

ZUR PROBLEMATIK DER SPEZIFISCHEN
ENTKOPPLUNG BEI DEFORMIERTEN
GG - KERNEN

von
Günter Wunner
aus
Darmstadt

1976



Digitized by the Internet Archive
in 2026

ZUR PROBLEMATIK DER SPEZIFISCHEN ENTKOPPLUNG BEI DEFORMIERTEN GG - KERNEN

Den Naturwissenschaftlichen Fachbereichen
der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg

zur

Erlangung des Doktorgrades

vorgelegt

von

Günter Wunner

aus

Darmstadt



Als Dissertation genehmigt von den Naturwissenschaftlichen Fach-
bereichen der Universität Erlangen-Nürnberg

Tag der mündlichen Prüfung: 24.11.1976

Vorsitzender der Promotionskommission: Professor Dr. E. Schweizer

Erstberichterstatter: Professor Dr. H. Volz

Zweitberichterstatter: Wiss. Rat Dr. H. Ruder

Bei Herrn Professor Dr. H. Volz, der mir in zahlreichen Gesprächen wertvolle Anregungen zu Form und Inhalt dieser Arbeit gegeben hat, möchte ich mich herzlich bedanken.

Mein Dank gilt auch Herrn Wissenschaftlichen Rat Dr. H. Ruder und meinen Kollegen am Institut für regen Gedankenaustausch, welcher zur Klärung mancher Fragen beigetragen hat.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung

Teil A: Allgemeine Überlegungen zur spezifischen Entkopplung bei deformierten gg -Kernen

- I. Vorbemerkung: Die Theorie der spezifischen Entkopplung (nach Ruder und Volz)
 1. Einführung innerer und kollektiver Koordinaten
 2. Transformation des Hamiltonoperators
 3. Spezifische Entkopplung
- II. Problemstellung und allgemeiner Lösungsansatz
 1. Problemstellung: Spezifische Entkopplung bei deformierten gg -Kernen
 2. Allgemeinster mathematischer Ansatz für die Definition eines körpergebundenen Koordinatensystems
- III. Lösungsmethode: Extremalprinzip der spezifischen Entkopplung
 1. Das Extremalprinzip der spezifischen Entkopplung für Rotationszustände mit $K = 0$
 2. Der Operator des reziproken Trägheitstensors in Abhängigkeit von den Bestimmungsfunktionen S_1, S_2
 3. Die Erwartungswerte von $\Theta_{\xi\xi}^{-1}, \Theta_{\eta\eta}^{-1}$ in Abhängigkeit von den Bestimmungsfunktionen S_1, S_2

IV. Das Konzept intrinsischer Dichten (Berechnung von Erwartungswerten mit Hilfe intrinsischer Dichten)

1. Vorbemerkung
2. Innere Einteilchendichte
3. Beispiel zur inneren Einteilchendichte
4. Innere Zwei- und Mehrteilchendichten

V. Lösungsidee

Teil B: Lösung des Extremalprinzips der spezifischen Entkopplung für den Einteilchenansatz

I. Einteilchenansatz

II. Mathematische Form des Extremalprinzips für den Einteilchenansatz

III. Mathematische Lösung des Extremalprinzips für gewisse Modelle der Einteilchendichte

1. Konstante Einteilchendichte
2. Erweitertes Modell für die deformierte Einteilchendichte
3. Berechnung des effektiven Trägheitsmoments
4. Diskussion der Ergebnisse

Teil C: Lösung des Extremalprinzips der spezifischen Entkopplung für den Zweiteilchenansatz

I. Zweiteilchenansatz

- II. Mathematische Form des Extremalprinzips für den Zweiteilchenansatz
- III. Allgemeine Überlegungen zu Modellen der intrinsischen Zwei- und Dreiteilchendichte
 - 1. Begründung der Notwendigkeit von Modellen
 - 2. Forderungen an Modelle für intrinsische Dichten bei Atomkernen
- IV. Modell für den Deformationscharakter der Dichten
 - 1. Aufstellung des Modells
 - 2. Auswertung der Nebenbedingungen für das Modell einer deformierten Zweiteilchendichte
- V. Aufstellung eines schematischen Modells der runden Dichten
 - 1. Vorbereitendes Beispiel: Dichten von BCS- Zuständen
 - 2. Aufstellung eines schematischen Modells für die runde Zweiteilchendichte
 - 3. Aufstellung eines schematischen Modells für die runde Dreiteilchendichte
 - 4. Diskussion der Produktbeziehungen
- VI. Lösung des Extremalprinzips für das schematische Modell der Dichten
 - 1. Aufgabenstellung
 - 2. Durchführung der Lösung
 - 3. Schlußbemerkung

Teil D: Anhang

- I. Modellrechnung: mittlere Teilchenzahl pro Längeneinheit und Schwankung der mittleren Teilchenzahl pro Längeneinheit für ein eindimensionales Fermionensystem
- II. Herleitung der Einteilchendichten, welche beim Einteilchenansatz auf Hauptträgheitsachsen führen
- III. Herleitung der anomalen Dichte für nach Spin und Drehimpuls klassifizierte Basiszustände
- IV. Zur Diskussion der Produktbeziehungen beim schematischen Modell der Dichten

Einleitung

Den in der Literatur üblichen Methoden zur Beschreibung kollektiver Rotationen von Kernen (Hartree-Fock- und Hartree-Fock-Bogoljubov-Rechnungen mit Drehimpulsprojektion vor (z.B. [1 - 8]) oder nach der Variation (z.B. [9]), und andere Rechnungen [10 - 12]) ist gemein, daß die Begründung der dabei erhaltenen oder verwendeten Berechnungsvorschriften für das Trägheitsmoment vom theoretischen Standpunkt aus als nicht völlig befriedigend angesehen werden muß. Dies liegt in der Hauptsache an der nicht hinreichend konsequenten Behandlung kollektiver Rotationen.

Wir beschreiben in dieser Arbeit die kollektiven Rotationen von gg -Kernen mit der von Ruder und Volz [13 - 16] entwickelten Methode der spezifischen Entkopplung, welche (für kleine Drehimpulse) eine *e x a k t e* Beschreibung kollektiver Rotationen darstellt. Entscheidend bei dieser Methode ist die Einführung eines körpergebundenen Koordinatensystems, welches außer von der jeweiligen Punktkonfiguration auch von dem inneren Grundzustand $\Phi_0(q)$ des betrachteten Teilchensystems abhängt, und zwar in der Weise, daß die bei Umschreibung des Hamiltonoperators auf innere und kollektive Koordinaten auftretenden, von der Definition des körpergebundenen Systems abhängigen Kopplungsglieder bei Anwendung auf $\Phi_0(q)$ verschwinden. Diese Methode ist bereits mit Erfolg bei Systemen mit kleiner Teilchenzahl [17 - 20] angewandt worden.

Wir untersuchen in dieser Arbeit die Frage, ob das Konzept der spezifischen Entkopplung - das Trägheitsmoment über die Definition eines körpergebundenen Koordinatensystems zu ermitteln - auch bei deformierten gg-Kernen im Massenzahlbereich der Lanthaniden und Aktiniden p r a k t i s c h voll durchgeführt werden kann. Insbesondere wird uns dabei die Frage beschäftigen, in welcher Weise der Einfluß von Zweiteilchenkorrelationen auf das effektive Trägheitsmoment im Rahmen der Methode der spezifischen Entkopplung erfaßt werden kann.

In Teil A stellen wir zunächst allgemeine Überlegungen zur spezifischen Entkopplung bei deformierten gg-Kernen an. Als entscheidend erweist sich dabei die Einführung von Bestimmungsfunktionen S_1 , S_2 , deren Verschwinden in Abhängigkeit von den auf das gesuchte körpergebundene System bezogenen Teilchenkoordinaten die Lage dieses Systems in einer gegebenen Punktkonfiguration definiert.

Die Ermittlung dieser zunächst noch unbekannten Funktionen erfolgt über das Extremalprinzip der spezifischen Entkopplung. Zu diesem Zweck bringen wir das Extremalprinzip auf eine Form, in der es die Bestimmungsfunktionen S_1 , S_2 bzw. deren Ableitungen explizit enthält, diese also durch Variation nach S_1 , S_2 ermittelt werden können, und entwickeln mit Hilfe des Konzepts intrinsischer Dichten eine Methode, die es gestattet, die bei der Anwendung des Extremalprinzips notwendigen Integrale über die inneren Freiheitsgrade auszuwerten.

Das Vorgehen bei der Lösung des Extremalprinzips ist iterativ. In Teil B betrachten wir zunächst den Fall, daß die Bestimmungsfunktionen in der Form (lokaler) Einteilchenoperatoren angesetzt sind (Einteilchenansatz). Dieser Ansatz erweist sich von vorneherein als sinnvoll nur für Systeme wechselwirkungs-freier Teilchen ("unabhängige" Bosonen). Die Lösung des Extremalprinzips führt auf Hauptträgheitsachsen und das (mit dem Experiment bei deformierten gg-Kernen verglichen um einen Faktor $3 - 4$ zu kleine) hydrodynamische Trägheitsmoment.

In Teil C untersuchen wir den Zweiteilchenansatz, bei welchem die Bestimmungsfunktionen in der Form (lokaler) Zweiteilchenoperatoren angenommen werden. Dieser Ansatz erweist sich insbesondere als notwendig für die von uns betrachteten Systeme wechselwirkender Fermionen, da erst ein Zweiteilchenansatz (wegen des Auftretens der Zweiteilchendichte im Extremalprinzip) Korrelationen innerhalb der Wellenfunktion berücksichtigen kann. Dies erschließt die Möglichkeit, den Einfluß von Zweiteilchenkorrelationen auf das effektive Trägheitsmoment von gg-Kernen im Rahmen der Methode der spezifischen Entkopplung zu untersuchen und außerdem aus dem Vergleich mit dem empirischen Trägheitsmoment Rückschlüsse auf die tatsächlich wirksame Zweiteilchenkorrelation zu ziehen.

Da die "wahren" Mehrteilchendichten bei Atomkernen nicht hinreichend gut bekannt sind, ist man auf eine modellhafte Behandlung der Dichten angewiesen. Nach Einführung eines Modells für den Deformationscharakter der Dichten und einer ge-

naueren Untersuchung der Dichten, die sich für Paarungswellenfunktionen vom BCS-Typ ergeben, gelangen wir zu einem schematischen Modell für die Dichten, von dem wir annehmen können, daß es die Grundzüge der "wahren" Dichten bei Atomkernen hinreichend gut darzustellen vermag.

Die Lösung des Extremalprinzips für den Zweiteilchenansatz innerhalb des schematischen Modells führt auf eine gegenüber Hauptträgheitsachsen verbesserte Definition des körpergebundenen Systems und liefert für das Trägheitsmoment eine Vergrößerung um den richtigen Faktor. Die dabei wirksame Zweiteilchenkorrelation stellt sich innerhalb unseres Modells als kurzreichweitige Wechselwirkung anziehenden Charakters heraus. Die durch diese Wechselwirkung verursachte Dichtekorrektur im Nahbereich erweist sich als von derselben Größenordnung wie bei einer Paarwechselwirkung vom BCS-Typ.

Teil A

Allgemeine Überlegungen zur spezifischen Entkopplung bei deformierten gg-Kernen

I. Vorbemerkung: Die Theorie der spezifischen Entkopplung
(nach Ruder und Volz [13-16])

Bevor wir die Problemstellung dieser Arbeit erörtern können, ist es notwendig, einen kurzen Überblick über die von Ruder und Volz entwickelte Theorie der spezifischen Entkopplung und deren Zusammenhang mit der Beschreibung kollektiver Rotationen zu geben. Bezüglich der Einzelheiten sei auf die zitierten Arbeiten verwiesen.

1. Einführung innerer und kollektiver Koordinaten

Wir denken uns ein System aus N ununterscheidbaren Teilchen vorgegeben, zwischen denen nur innere Kräfte wirken. Der Hamiltonoperator des Systems, $H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + V_{WW}$, ist invariant unter Permutationen der Teilchen sowie unter Translationen und Rotationen des Gesamtsystems. Während die Behandlung der Permutationssymmetrie bei Verwendung von auf ein raumfestes Koordinatensystem bezogenen Ortsvektoren $\underline{r}_i$ sehr einfach ist, erweist es sich bei anderen Fragestellungen - insbesondere bei der Untersuchung kollektiver Bewegungen des Systems - als zweckmäßig, andere Koordinaten zu verwenden, die der Translations- und Rotationssymmetrie des Systems besser angepaßt sind. Dies geschieht in der Weise, daß man neben

Schwerpunktskoordinaten ein körpergebundenes Koordinatensystem einführt, das sich bei Drehungen des Teilchensystems in der gleichen Weise mitdreht. Die verbleibenden $3N-6$ Freiheitsgrade des Teilchensystems lassen sich dann durch translations- und rotationsvariante innere Koordinaten q_i beschreiben.

Wir führen als Koordinaten ein:

- a) den Schwerpunktsvektor $\underline{R} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \underline{r}_i$.
- b) drei Eulersche Winkel α, β, γ , die die Lage eines eindeutig in die Teilchenkonfiguration definierten ξ, η, ζ -Koordinatensystems relativ zu einem raumfesten Koordinatensystem festlegen,
- c) $3N-6$ innere Koordinaten q_i .

Die Definition der Eulerschen Winkel, α, β, γ ist aus Fig. 1 ersichtlich.

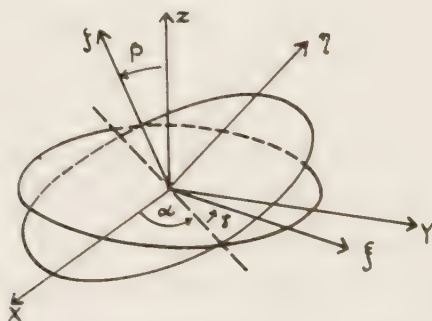


Fig. 1: Definition der Eulerschen Winkel α, β, γ

2. Transformation des Hamiltonoperators

Wir schreiben nun den Hamiltonoperator des Systems auf die im vorhergehenden Abschnitt eingeführten Koordinaten um.

Da nur innere Kräfte vorliegen, hängt V_{WW} nur von inneren Koordinaten ab. Es genügt also, den Operator der kinetischen Energie, $T = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}$, zu betrachten. Wir ermitteln zunächst, wie sich der Impulsoperator $p_i = \hbar/i \nabla_i$ durch die neuen Koordinaten ausdrückt. Dazu verwenden wir, daß p_i die infinitesimale Erzeugende einer Translation von Teilchen i ist. Verrücken wir Teilchen i um die infinitesimale Strecke Δ_a^i in die körperfeste $\underline{e}_a$ - Richtung ($a = \xi, \eta, \zeta$, $\underline{e}_a$ der zugehörige körperfeste Einheitsvektor),

$$\delta \underline{r}_i = \Delta_a^i \underline{e}_a,$$

so erhalten wir folgende Koordinatenänderungen:

a) für den Schwerpunktsvektor: $\delta \underline{R} = \frac{1}{N} \delta \underline{r}_i = \frac{1}{N} \underline{e}_a \Delta_a^i,$

b) für die inneren Koordinaten: $\delta q_j = F_{ja}^i(q) \cdot \Delta_a^i,$

c) gleichzeitig verdreht sich das körperfeste Koordinatensystem um den infinitesimalen Drehvektor $\delta \underline{\phi}$, für dessen körperfeste Komponenten wir setzen: $\delta \phi_b = B_{ab}^i(q) \cdot \Delta_a^i.$

Insgesamt bekommt man als Beziehung für die entsprechenden infinitesimalen Erzeugenden:

$$\delta \underline{r}_i \cdot \nabla_i = \delta \underline{R} \cdot \nabla_{\underline{R}} + \sum_j \delta q_j \frac{\partial}{\partial q_j} + \frac{i}{\hbar} \sum_{b=\xi,\eta,\zeta} \delta \phi_b \cdot L_b,$$

oder:

$$\underline{e}_a \cdot \underline{p}_i = \frac{1}{N} \underline{e}_a \cdot \frac{\hbar}{i} \nabla_{\underline{R}} + \sum_j F_{ja}^i(q) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_j} + \sum_{b=\xi,\eta,\zeta} B_{ab}^i(q) L_b,$$

woraus folgt:

$$p_i = \frac{1}{N} \frac{\hbar}{i} \nabla_R + \sum_{\alpha=f,\eta,\zeta} \sum_j F_{ja}^i(q) e_a \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_j} + \sum_{\alpha=f,\eta,\zeta} \sum_{b=f,\eta,\zeta} B_{ab}^i(q) e_a L_b .$$

Dabei ist L_b ($b = \zeta, \eta, \zeta$) die b -Komponente des körperfesten Drehimpulsoperators, der nur von den Eulerschen Winkeln α, β, γ abhängt. Die Größen F_{ja}^i , B_{ab}^i nennt man Mitführungs-koeffizienten. Sie hängen nur von inneren Koordinaten sowie von der Definition des körperfesten Koordinatensystems ab.

F_{ja}^i gibt an, wie sich die innere Koordinate q_j ändert, wenn Teilchen i um die Strecke Δ_a^i in Richtung der körperfesten a - Achse verrückt wird:

$$F_{ja}^i(q) = \frac{\delta q_j}{\Delta_a^i} .$$

B_{ab}^i gibt an, um welchen infinitesimalen Drehwinkel $\delta\phi_b$ das körperfeste System nachgedreht wird, wenn Teilchen i um die Strecke Δ_a^i in Richtung der körperfesten a - Achse verrückt wird:

$$(A, I, 1) \quad B_{ab}^i(q) = \frac{\delta\phi_b}{\Delta_a^i} .$$

Setzt man den oben gewonnenen Ausdruck für p_i in den Operator der kinetischen Energie ein, so erhält man unter Ausnützung der Vertauschungsrelationen des körperfesten Drehimpulses mit den körperfesten Einheitsvektoren und der Beziehungen $\sum_{i=1}^N F_{ja}^i = \sum_{i=1}^N B_{ab}^i = 0$, die sich daraus ergeben, daß sich die inneren Koordinaten, und damit die Lage des körpergebunde-

nen Systems in der Konfiguration, bei einer gemeinsamen Translation aller Teilchen nicht ändern:

$$H = H_0(q, \frac{\partial}{\partial q}) + \underline{A}(q, \frac{\partial}{\partial q}) \cdot \underline{L} + \frac{1}{2} \underline{L} \underline{\Theta}^{-1} \underline{L}$$

(die Schwerpunktsenergie ist weggelassen). Dabei ist:

$$A_a = \frac{1}{m} \cdot \frac{\hbar}{i} \left\{ \sum_{i,j} \sum_{b=\{j,\eta_j\}} F_{ib}^i B_{ba}^i + \right. \\ (A, I, 2) \quad \left. \sum_{i,j} \sum_{b=\{j,\eta_j\}} \left(F_{ib}^i \frac{\partial B_{ba}^i}{\partial q_j} + \sum_{c,d=\{j,\eta_j\}} \epsilon_{bcd} B_{bc}^i B_{da}^i \right) \right\}$$

$$\Theta_{ab}^{-1} = \frac{1}{m} \sum_i \sum_{c=\{j,\eta_j\}} B_{ca}^i B_{cb}^i$$

3. Spezifische Entkopplung

Die zuletzt gewonnene Form des Hamiltonoperators ist, wie wir im folgenden sehen werden, zur Beschreibung kollektiver Rotationen geeignet.

Da H drehinvariant ist, kann man die zugehörigen Eigenfunktionen nach Drehimpuls und dessen raumfester z -Komponente klassifizieren (Quantenzahlen l, m). Diese Eigenfunktionen ϕ_{lm}^L lassen sich entwickeln nach dem vollständigen System der Eigenfunktionen $\phi_0(q)$ von $H_0(q)$ und dem bezüglich der Euler'schen Winkel vollständigen System der Kugelfunktionen

$$D_{MN}^L(\alpha, \beta, \gamma):$$

$$\psi_M^L = \sum_{N, \tau} c_{N, \tau} \phi_0(q) D_{MN}^{L*}(\alpha, \beta, \gamma)$$

Ausgehend von einer Störungsrechnung mit dem Drehimpuls als Störparameter, bei der der Term $\underline{A}(q) \cdot \underline{L}$ in H als Störglied erster Ordnung, der Term $\frac{1}{2} \underline{L} \cdot \underline{Q}^{-1} \underline{L}$ als Störglied zweiter Ordnung aufgefaßt wird, hat man KUPFER [15] gezeigt, daß die Wellenfunktion ψ_M^L bis einschließlich zur ersten Ordnung in $\underline{L}$ Produktform besitzt,

$$(A, I, 3) \quad \psi_M^L = \phi_0(q) \sum_N c_{N, 0} D_{MN}^{L*}(\alpha, \beta, \gamma),$$

wenn man das körpergebundene Koordinatensystem so in das Teilchensystem hineindefiniert, daß die Beziehung

$$(A, I, 4) \quad \underline{A}(q, \frac{\partial}{\partial q}) \phi_0(q) = \underline{0}$$

erfüllt ist. Die Störungsenergien bis einschließlich zur zweiten Ordnung in $\underline{L}$ ergeben sich dann einfach als Erwartungs-

werte der obigen Wellenfunktion mit dem in $\underline{L}$ quadratischen Anteil des Hamiltonoperators $H_{\text{rot}} = \frac{1}{2} \underline{L} \underline{\Theta}^{-1} \underline{L}$.

Diese Methode, das körpergebundene Koordinatensystem zu wählen, bezeichnet man als "spezifische Entkopplung", da in diesem Fall für eine gegebene innere Wellenfunktion $\phi_0(q)$ innere und kollektive Bewegungen des Teilchensystems bis zu der Ordnung der Störung, welche dem Konzept kollektiver Rotationen mit Rotationsenergien proportional zu $\underline{L}^2$ entspricht, vollständig entkoppeln.

Allgemein ist mit dem Begriff kollektiver Rotationen die Vorstellung verknüpft, daß sich auf einem Drehimpulsfreien, nur von inneren Koordinaten abhängigen Grundzustand $\phi_0(q)$ eine Rotationsbande in der Weise aufbaut, daß die innere Struktur des Systems hinreichend unverändert bleibt, und der Rotationscharakter der Zustände durch Kreiselfunktionen ausgedrückt wird, die als Faktoren zum Grundzustand hinzutreten:

$$\psi_M^L = \phi_0(q) \cdot \sum_K c_K^L D_{MK}^{L*}(\alpha, \beta, \gamma) \quad .$$

Diese Produktform der Wellenfunktion liegt aber nach Euler [15], genau dann vor, wenn die Eulerschen Winkel α, β, γ zu dem körperfesten Koordinatensystem der spezifischen Entkopplung gezählt werden. An dieser Stelle ist ersichtlich, daß die Methode der spezifischen Entkopplung einen Zugang zur konsequenten Beschreibung kollektiver Rotationen bedeutet. Der reziproke Trägheitstensor $\langle \psi_M^L | \underline{\Theta}^{-1} | \psi_M^L \rangle$, berechnet für das körpergebundene Koordinatensystem der spezifischen Entkopplung, liefert dabei die zu den kollek-

tiven Rotationen gehörigen Trägheitsmomente, welche mit dem Experiment verglichen werden können.

Die Beziehung (A,I,4) erweist sich als Euler-Lagrangegleichung eines Variationsprinzips, bei dem man das Funktional der Rotationsenergie $\langle \psi_M^L | \frac{1}{2} \underline{L} \underline{\Theta}^{-1} \underline{L} | \psi_M^L \rangle$ in Abhängigkeit von der Wahl des körpergebundenen Koordinatensystems minimalisiert:

$$(A,I,5) \quad \langle \psi_M^L | \frac{1}{2} \underline{L} \underline{\Theta}^{-1} \underline{L} | \psi_M^L \rangle \stackrel{!}{=} \min.$$

Zur Bestimmung des spezifisch entkoppelnden körpergebundenen Koordinatensystems und der zugehörigen Trägheitsmomente können also das Differentialprinzip (A,I,4) oder das Extremalprinzip (A,I,5) dienen.

Nach diesem kurzen Überblick über die Theorie der spezifischen Entkopplung sind wir nun in der Lage, das Problem zu formulieren, mit welchem sich diese Arbeit befassen wird.

II. Problemstellung und allgemeiner Lösungsansatz

1. Problemstellung: Spezifische Entkopplung bei deformierten gg -Kernen

Allgemein können Teilchensysteme, welche innere Energiestufen mit hinreichend großen Abständen aufweisen, kollektive Rotationen ausführen. Wir betrachten in dieser Arbeit speziell die kollektiven Rotationen deformierter gg -Kerne. Dem experimentellen Befund entsprechend folgen die Energiestufen solcher Rotationen bis zu relativ hohen Drehimpulswerten einem Gesetz der Form $E = \text{const.} \cdot L \cdot (L+1)$ ^{*)}. Sie entsprechen also den Energiestufen eines symmetrischen Kreisel, dessen Drehimpuls senkrecht zur Figurenachse steht ($K = 0$).

Da wir es bei einem deformierten gg -Kern nicht mit einem starren Körper, sondern mit einem quantenmechanischen System von Massenpunkten zu tun haben, stellt sich die Frage, auf welche Weise die Figurenachse des "symmetrischen Kreisel" in das Teilchensystem hineindefiniert werden kann.

Wie wir in I.3. gesehen haben, muß dies mit Hilfe der Methode der spezifischen Entkopplung geschehen, da für Systeme mit $K = 0$ die Gesamtwellenfunktion bei Wahl des spezifisch ent-

*)

Abweichungen von diesem Gesetz können bei unseren Überlegungen außer Betracht bleiben.

koppelnden körpergebundenen Koordinatensystems nach Gleichung (A,I,3) die Form:

$$(A,II,1) \quad \psi_M^L = \phi_0(q) \cdot D_{M0}^{L*}(\alpha, \beta, \gamma)$$

annimmt, welche dem Bilde eines kollektiv rotierenden symmetrischen Kreisels mit $K = 0$ entspricht.*)

Wir werden daher in dieser Arbeit die Frage untersuchen, wie man für deformierte gg-Kerne (im Massenbereich der Lanthaniden und Aktiniden) dasjenige körpergebundene Koordinatensystem ermitteln kann, für welches spezifische Entkopplung zwischen der inneren Bewegung und den kollektiven Rotationen der Kerne vorliegt.

Wie aus Fig.1 zu ersehen ist, legen die Eulerschen Winkel α , β die Lage der ζ -Achse fest, die in unserem Fall die Figurenachse sein soll, γ die Lage der ξ - und η -Achse. Die Gesamtwellenfunktion ψ_M^L von (A,II,1) hängt wegen $K = 0$ außer von inneren Koordinaten nur von α und β ab. Für ψ_M^L ist daher nur die Lage der körpergebundenen ζ -Achse von Bedeutung, während die Lage der ξ - und η -Achse unwesentlich ist.

*)

Die Vorstellung der Axialsymmetrie des Kreisels bedeutet dabei eine Forderung an die Grundzustandswellenfunktion $\phi_0(q)$: $\phi_0(q)$ muß so beschaffen sein, daß die dazugehörigen Ein- und Mehrteilchendichten vom Koordinatensystem der spezifischen Entkopplung aus betrachtet Axialsymmetrie bezüglich der ζ -Achse besitzen.

Die Aufgabe, für deformierte gg -Kerne das Koordinatensystem der spezifischen Entkopplung zu finden, reduziert sich somit darauf, eine körpergebundene ζ - Achse so in das Teilchensystem hineinzudefinieren, daß sich die in $(A, II, 1)$ angegebene Darstellung von Rotationszuständen ergibt.

2. Allgemeinster mathematischer Ansatz für die Definition eines körpergebundenen Koordinatensystems

In diesem Abschnitt bezeichnen wir mit $\underline{r}'_i$ die auf ein körpergebundenes Koordinatensystem bezogenen kartesischen Koordinaten von Teilchen i . Diese Koordinaten sind offensichtlich redundant, da die Zahl der inneren Freiheitsgrade nur $3N-6$ ist.

Es tritt nun die Frage auf, wie man den allgemeinsten Ansatz für die Definition eines körpergebundenen Koordinatensystems mathematisch erfassen kann.

Wir behaupten:

Die allgemeinste Vorschrift, die auf wohldefinierte Weise einer vorgegebenen Teilchenkonfiguration ein körpergebundenes $\xi\eta\zeta$ - System zuordnet, hat (solange wir noch keine Axialsymmetrie voraussetzen) die Form:

$$\begin{aligned} (A, II, 2) \quad S_1(\underline{r}'_1, \dots, \underline{r}'_N) &= 0, \\ S_2(\underline{r}'_1, \dots, \underline{r}'_N) &= 0, \\ S_3(\underline{r}'_1, \dots, \underline{r}'_N) &= 0. \end{aligned}$$

In Worten: man lege ein $\xi\eta\zeta$ - System in eine Teilchenkonfiguration so, daß drei vorgegebene linear unabhängige Funktionen S_1, S_2, S_3 in Abhängigkeit von den auf das körpergebundene System bezogenen Teilchenkoordinaten $\underline{r}'_i$ den Wert Null haben.

Wenn wir eine feste innere Konfiguration ins Auge fassen, gegeben durch das Variablensystem q_0 , so gilt $\underline{r}'_i = \underline{r}'_i(q_0, \alpha, \beta, \gamma)$, und man hat mit (A, II, 2) drei Gleichungen zur Bestimmung der drei Eulerschen Winkel α, β, γ , die die Lage des körperge-

bundenen Systems relativ zu einem raumfesten Koordinatensystem festlegen, womit der Beweis unserer Behauptung klar ist.

Wir bemerken, daß durch die drei Gleichungen (A,II,2) und durch die Beziehung $\sum_{i=1}^N \underline{r}'_i = \underline{0}$ (Wahl des Schwerpunkts als Koordinatenursprung) die formal $3N$ Freiheitsgrade der Koordinaten $\underline{r}'$ auf $3N-6$ reduziert werden. Nur die Koordinatensätze $\underline{r}'$, die diesen Nebenbedingungen genügen, entsprechen tatsächlich vorkommenden Konfigurationen, sie beschreiben den "physikalischen Bereich".

Da im Fall der Axialsymmetrie nur eine körpergebundene ζ - Achse gesucht ist, die ζ - Achse aber durch α und β allein festgelegt ist, kommt man für diesen Fall mit zwei unabhängigen Bestimmungsgleichungen aus. Der allgemeinste Ansatz für die Definition einer körpergebundenen ζ - Achse in eine gegebene Teilchenkonfiguration hat also in diesem Fall die Gestalt:

$$S_1(\underline{r}'_1, \dots, \underline{r}'_N) = 0, \\ (A, II, 3)$$

$$S_2(\underline{r}'_1, \dots, \underline{r}'_N) = 0.$$

Unsere Aufgabe, eine körpergebundene ζ - Achse zu ermitteln, so daß innere Bewegung und kollektive Rotation spezifisch entkoppelt sind und damit die Wellenfunktion die Produktform (A,II,1) annimmt, besteht somit darin, zwei Funktionen S_1, S_2 zu finden, welche über die Gleichungen (A,II,3) die spezifisch entkoppelnde ζ - Achse definieren.

III. Lösungsmethode: Extremalprinzip der spezifischen

Entkopplung

1. Das Extremalprinzip der spezifischen Entkopplung für

Rotationszustände mit $K = 0$

Der Ausgangspunkt für die Ermittlung der richtigen körpergebundenen $\mathfrak{J}$ -Achse ist das zur spezifischen Entkopplung äquivalente Extremalprinzip

$$\langle \psi_M^L | \frac{1}{2} \underline{L} \underline{\Theta}^{-1} \underline{L} | \psi_M^L \rangle \stackrel{!}{=} \min. .$$

Wegen der Produktform der Wellenfunktion ψ_M^L (vgl. (A, II, 1)) wird hieraus

$$\frac{1}{2} \langle D_{M0}^{L*} | \underline{L} \langle \phi_0 | \underline{\Theta}^{-1} | \phi_0 \rangle \underline{L} | D_{M0}^{L*} \rangle \stackrel{!}{=} \min. .$$

Wir diskutieren nun, welche Komponenten des Tensors $\langle \phi_0 | \underline{\Theta}^{-1} | \phi_0 \rangle$ in diesem Ausdruck explizit vorkommen. Wegen $L_{\mathfrak{Y}} D_{M0}^L = 0$ gehen zunächst die Komponenten $\langle \Theta_{\mathfrak{f}\mathfrak{Y}}^{-1} \rangle$, $\langle \Theta_{\eta\mathfrak{Y}}^{-1} \rangle$, $\langle \Theta_{\mathfrak{Y}\mathfrak{Y}}^{-1} \rangle$ nicht ein. Da außerdem der Erwartungswert von $L_{\mathfrak{f}} L_{\eta} + L_{\eta} L_{\mathfrak{f}}$ mit D_{M0}^L verschwindet, ist auch $\langle \Theta_{\mathfrak{f}\eta}^{-1} \rangle$ für das Funktional unwesentlich, so daß nur $\langle \Theta_{\mathfrak{f}\mathfrak{f}}^{-1} \rangle$ und $\langle \Theta_{\eta\eta}^{-1} \rangle$ eingehen.

Insgesamt erhalten wir damit:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \langle D_{M0}^{L*} | \underline{L} \langle \phi_0 | \underline{\Theta}^{-1} | \phi_0 \rangle \underline{L} | D_{M0}^{L*} \rangle &= \\ \frac{1}{2} \langle D_{M0}^{L*} | L_{\mathfrak{f}}^2 \langle \phi_0 | \Theta_{\mathfrak{f}\mathfrak{f}}^{-1} | \phi_0 \rangle + L_{\eta}^2 \langle \phi_0 | \Theta_{\eta\eta}^{-1} | \phi_0 \rangle | D_{M0}^{L*} \rangle &= \\ \frac{1}{2} \hbar^2 L(L+1) \cdot \langle \phi_0 | \frac{1}{2} (\Theta_{\mathfrak{f}\mathfrak{f}}^{-1} + \Theta_{\eta\eta}^{-1}) | \phi_0 \rangle . \end{aligned}$$

Der im Bracket stehende Ausdruck hat die Bedeutung eines effektiven reziproken Trägheitsmoments:

$$\langle \Theta^{-1} \rangle = \frac{1}{2} \langle \phi_0 | \Theta_{\xi\xi}^{-1} + \Theta_{\eta\eta}^{-1} | \phi_0 \rangle .$$

Die Aussage des Extremalprinzips der spezifischen Entkoppelung für Rotationszustände mit $K = 0$ besteht somit darin, daß bei vorgegebenem ϕ_0 das effektive reziproke Trägheitsmoment in Abhängigkeit von der Definition der körpergebundenen ζ - Achse minimal wird:

$$\langle \Theta^{-1} \rangle = \frac{1}{2} \langle \phi_0 | \Theta_{\xi\xi}^{-1} + \Theta_{\eta\eta}^{-1} | \phi_0 \rangle \stackrel{!}{=} \min. .$$

Der Zahlenwert von $\langle \Theta^{-1} \rangle$ für die spezifisch entkoppelnde ζ - Achse ergibt dann das zu den kollektiven Rotationen mit $K = 0$ gehörige Trägheitsmoment:

$$\Theta_{\text{eff}} = \frac{1}{\langle \Theta^{-1} \rangle_{\text{extr}}} .$$

Das Extremalprinzip in der obigen Form wird im weiteren der Ausgangspunkt zur Bestimmung der die spezifisch entkoppelnde ζ - Achse definierenden Bestimmungsfunktionen sein.

Dazu ist zunächst notwendig, zu berechnen, in welcher Weise $\langle \Theta^{-1} \rangle$ von S_1 und S_2 abhängt. Dies wird im folgenden Abschnitt geschehen.

2. Der Operator des reziproken Trägheitstensors ist abhängig-
keit von den Bestimmungsfunktionen S_1, S_2 .

Wie in [1,2], schreiben wir für die auf das körperfeste System bezogenen redundanten kartesischen Teilchenkoordinaten $\underline{x}_i$ ($i=1, \dots, N$). Die körpergebundene $\bar{y}$ -Achse sei durch die zwei unabhängigen Gleichungen

$$(A, III, 1) \quad S_1(\underline{x}_1', \dots, \underline{x}_N') = 0 \quad , \quad S_2(\underline{x}_1', \dots, \underline{x}_N') = 0$$

definiert. Wir drücken nun die für das Extremalprinzip interessierenden Komponenten des reziproken Trägheitstensors

$$B_{ij}^{-1}, B_{ij}^{-1}$$

durch S_1, S_2 aus.

B_{ij}^{-1}, B_{ij}^{-1} schreiben sich in Abhängigkeit von den Verdrünnungs-
koeffizienten S_{ab}^i nach Gleichung (A.1.2) wie folgt:

$$B_{ij}^{-1} = \frac{1}{m} \sum_{a=1}^N \sum_{\alpha=\bar{j}, \bar{i}} (S_{a\bar{j}}^i)^2$$

$$B_{ij}^{-1} = \frac{1}{m} \sum_{a=1}^N \sum_{\alpha=\bar{j}, \bar{i}} (S_{a\bar{i}}^j)^2$$

S_{ab}^i gibt an, um welchen infinitesimalen Drehwinkel $\delta\varphi_a$ das körpergebundene Koordinatensystem nachgedreht wird, wenn Teilchen i um die infinitesimale Strecke Δ_a^i in Richtung der körperfesten a -Achse verrückt wird:

$$S_{ab}^i = \frac{\delta\varphi_a}{\Delta_a^i}$$

Mit Hilfe der die körpergebundene $\bar{y}$ -Achse definierenden Gleichungen (A.1.1, 2) können diese Koeffizienten berechnet werden.

Teilchen 1 werde in Richtung der körpergebundenen a - Achse um die infinitesimale Strecke $\delta \underline{r}_1 = \Delta_a^i \underline{e}_a$ verrückt. Der Relativvektor $\underline{r}_j = \underline{r}_j - \underline{r}_1$ von Teilchen j ($j = 1, \dots, N$) ändert sich dabei um

$$\delta \underline{r}_j = \delta \underline{r}_j - \delta \underline{r}_1 = \delta_{ij} \delta \underline{r}_1 - \frac{1}{N} \delta \underline{r}_1 = \delta \underline{r}_1 \left(\delta_{ij} - \frac{1}{N} \right).$$

Für die auf diese Weise entstehende Konfiguration sind die Gleichungen (A, III, 1) im allgemeinen nicht mehr erfüllt. Vielmehr ändert sich S_1 um ^{*)}

$$\begin{aligned} \delta S_1 &= \sum_j \delta \underline{r}_j^i \cdot \nabla_{\underline{r}_j^i} S_1 = \delta \underline{r}_1 \cdot \left(\nabla_{\underline{r}_1^i} S_1 - \frac{1}{N} \sum_j \nabla_{\underline{r}_j^i} S_1 \right) \\ &= \delta \underline{r}_1 \cdot \left(\nabla_{\underline{r}_1^i} S_1 - \frac{1}{N} \sum_j \nabla_{\underline{r}_j^i} S_1 \right) \end{aligned}$$

ozw., wenn wir zur Abkürzung $\left(\nabla_{\underline{r}_1^i} - \frac{1}{N} \sum_j \nabla_{\underline{r}_j^i} \right) = \tilde{\nabla}_i$ schreiben,

$$\delta S_1 = \delta \underline{r}_1 \cdot \tilde{\nabla}_i S_1 = \Delta_a^i \underline{e}_a \cdot \tilde{\nabla}_i S_1.$$

Für die Änderung von S_2 erhalten wir analog:

$$\delta S_2 = \delta \underline{r}_1 \cdot \tilde{\nabla}_i S_2 = \Delta_a^i \underline{e}_a \cdot \tilde{\nabla}_i S_2.$$

*)

δS_1 und δS_2 werden ermittelt bei festgehaltenem körpergebundenem Koordinatensystem (es verändert sich die Konfiguration).

Damit die Bestimmungsgleichungen (A,III,1) wieder gelten, muß die ξ -Achse in einer bestimmten Weise nachgeführt werden. Der auftretende Drehvektor ist $(\delta\phi_\xi, \delta\phi_\eta, \delta\phi_\gamma)$. Die infinitesimalen Erzeugenden, welche die Änderung einer von den $\underline{r}$ -Koordinaten abhängigen Funktion bei Drehungen des Koordinatensystems um körperfeste Achsen beschreiben, sind die Komponenten des Operators $\underline{L} = \sum_{i=1}^N \underline{r}_i \wedge \nabla_{\underline{r}_i}$. Bei der Nachführung der ξ -Achse ändern sich S_1, S_2 dann um: ^{*}

$$\delta S_1 = L_\xi S_1 \delta\phi_\xi + L_\eta S_1 \delta\phi_\eta + L_\gamma S_1 \delta\phi_\gamma$$

$$\delta S_2 = L_\xi S_2 \delta\phi_\xi + L_\eta S_2 \delta\phi_\eta + L_\gamma S_2 \delta\phi_\gamma$$

Die Bedingungsgleichungen (A,III,1) sind wieder erfüllt, wenn die Gesamtänderungen von S_1, S_2 Null sind:

$$(A,III,2) \quad \delta S_1 + \delta S_1' = 0, \quad \delta S_2 + \delta S_2' = 0$$

Bevor wir das hieraus fließende Gleichungssystem formulieren, zeigen wir, daß an die Bestimmungsfunktionen S_1, S_2 die zusätzliche Forderung gestellt werden muß, daß für alle Konfigurationen, für die $S_1 = 0, S_2 = 0$ ist, zugleich $L_\gamma S_1 = L_\gamma S_2 = 0$ wird.

^{*}
 δS_1 und δS_2 werden ermittelt bei festgehaltener Konfiguration (es verändert sich die Lage des körpergebundenen Koordinatensystems).

Da die Definition der ζ -Achse nur von der Konfiguration der Massenpunkte abhängen soll, darf eine spezielle Wahl der ξ -Achse die Lage der ζ -Achse nicht beeinflussen. Bezeichnen wir mit $R(\varphi)$ eine Drehung des körpergebundenen Koordinatensystems um die ζ -Achse um den Winkel φ , so müssen wir also verlangen: aus $S_1 = 0$, $S_2 = 0$ muß folgen $R(\varphi)S_1 = 0$, $R(\varphi)S_2 = 0$.

Da die Beziehungen $S_1 = 0$, $S_2 = 0$ (zusammen mit $\sum_{i=1}^N \underline{x}'_i = 0$) den physikalischen Bereich der redundanten $\underline{x}'$ -Variablen definieren, bedeutet dies, daß $R(\varphi)S_1$ und $R(\varphi)S_2$, eingeschränkt auf den physikalischen Bereich, verschwinden müssen:

$$R(\varphi)S_1|_{\text{phys. Bereich}} = R(\varphi)S_2|_{\text{phys. Bereich}} = 0.$$

Für infinitesimales φ ist $R(\varphi) = 1 + \varphi \cdot L_{Z'}$, und wir erhalten:

$$L_{Z'} S_1|_{\text{phys. Bereich}} = L_{Z'} S_2|_{\text{phys. Bereich}} = 0.$$

Da die Änderungen δS_1 , δS_1^i usw. nur auf dem physikalischen Bereich betrachtet werden, können somit die in δS_1^i , δS_2^i auftretenden Terme $L_{Z'} S_1$, $L_{Z'} S_2$ weggelassen werden. (A, III, 2) führt dann auf das inhomogene lineare Gleichungssystem:

$$(A, III, 3) \quad L_{x'} S_1 \cdot \delta \phi_{\xi} + L_{y'} S_1 \cdot \delta \phi_{\eta} + \Delta_a^i \underline{e}_a \cdot \tilde{\nabla}_i S_1 = 0$$

$$(A, III, 4) \quad L_{x'} S_2 \cdot \delta \phi_{\xi} + L_{y'} S_2 \cdot \delta \phi_{\eta} + \Delta_a^i \underline{e}_a \cdot \tilde{\nabla}_i S_2 = 0.$$

zur Bestimmung der Unbekannten $\delta \phi_{\xi}$, $\delta \phi_{\eta}$ bzw. $B_{a\xi}^i = \frac{\delta \phi_{\xi}}{\Delta_a^i}$, $B_{a\eta}^i = \frac{\delta \phi_{\eta}}{\Delta_a^i}$. Man errechnet hieraus:

$$B_{a\mathfrak{f}}^i = \frac{(L_{y^1} S_1 \cdot \tilde{\nabla}_i S_2 - L_{y^1} S_2 \cdot \tilde{\nabla}_i S_1) \cdot e_a}{L_{x^1} S_1 \cdot L_{y^1} S_2 - L_{y^1} S_1 \cdot L_{x^1} S_2}$$

$$B_{a\eta}^i = \frac{(L_{x^1} S_2 \cdot \tilde{\nabla}_i S_1 - L_{x^1} S_1 \cdot \tilde{\nabla}_i S_2) \cdot e_a}{L_{x^1} S_1 \cdot L_{y^1} S_2 - L_{y^1} S_1 \cdot L_{x^1} S_2}$$

und erhält als die allgemeinen Ausdrücke für $\theta_{\mathfrak{f}\mathfrak{f}}^{-1}$, $\theta_{\eta\eta}^{-1}$ in Abhängigkeit von S_1 , S_2 :

$$(A, III, 5a) \quad \theta_{\mathfrak{f}\mathfrak{f}}^{-1} = \frac{1}{\pi} \cdot \frac{\sum_{i=1}^N (L_{y^1} S_1 \cdot \tilde{\nabla}_i S_2 - L_{y^1} S_2 \cdot \tilde{\nabla}_i S_1)^2}{(L_{x^1} S_1 \cdot L_{y^1} S_2 - L_{y^1} S_1 \cdot L_{x^1} S_2)^2}$$

$$(A, III, 5b) \quad \theta_{\eta\eta}^{-1} = \frac{1}{\pi} \cdot \frac{\sum_{i=1}^N (L_{x^1} S_2 \cdot \tilde{\nabla}_i S_1 - L_{x^1} S_1 \cdot \tilde{\nabla}_i S_2)^2}{(L_{x^1} S_1 \cdot L_{y^1} S_2 - L_{y^1} S_1 \cdot L_{x^1} S_2)^2}$$

Wie man leicht nachrechnet, sind diese Ausdrücke invariant unter allen nichtsingulären, linearen Transformationen der Funktionen S_1 , S_2 , d.h. unter allen Transformationen vom Typ

$$\tilde{S}_1 = a_{11} S_1 + a_{12} S_2$$

$$\tilde{S}_2 = a_{21} S_1 + a_{22} S_2, \quad a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} \neq 0.$$

Dies ist unmittelbar einsichtig, da für jedes auf diese Weise gewonnene Paar von Funktionen $\tilde{S}_1$, $\tilde{S}_2$ aus $S_1 = 0$, $S_2 = 0$ auch $\tilde{S}_1 = 0$, $\tilde{S}_2 = 0$ folgt, S_1 , S_2 und $\tilde{S}_1$, $\tilde{S}_2$ also bezüglich der Definition einer gewissen körpergebundenen $\mathfrak{Y}$ -Achse ^{*)} völlig äquivalent sind.

Die hier festgestellte Freiheit wird im folgenden Abschnitt benutzt werden, um die Erwartungswerte von $\theta_{\mathfrak{f}\mathfrak{f}}^{-1}$, $\theta_{\eta\eta}^{-1}$ möglichst einfach zu gestalten.

^{*)} Tatsächlich gilt diese Invarianz noch für eine größere Mannigfaltigkeit von Transformationen, wir benötigen im folgenden jedoch nur diese.

3. Die Erwartungswerte von $\Theta_{\xi\xi}^{-1}$ und $\Theta_{\eta\eta}^{-1}$ in Abhängigkeit von den Bestimmungsfunktionen S_1, S_2

Für die folgenden Überlegungen seien zunächst einige Voraussetzungen und rechnerische Hilfsmittel vorgegeben.

Wir stellen uns vor, daß die Konfigurationen des Systems durch einen Satz von inneren Koordinaten q beschrieben werden, welche, solange wir eine feste Durchnummerierung der Teilchen betrachten, sich im q -Raum in einem verhältnismäßig begrenzten q -Bereich vorfinden, innerhalb dessen dann auch eine bestimmte Konfiguration q_0 mit maximaler Wahrscheinlichkeit auftritt.

$|\phi_0(q)|^2$ ist dann nur innerhalb dieses kleinen q -Bereichs wesentlich von Null verschieden. Teilchenvertauschungen machen hieraus einen anderen Wertesatz der q 's, für den Entsprechendes gilt.

Wir betrachten nun eine in den (redundanten) Teilchenkoordinaten $\underline{r}'$ totalsymmetrische Funktion $F(\underline{r}'_1, \dots, \underline{r}'_N)$, die innerhalb eines q -Bereichs, in dem $|\phi_0(q)|^2$ wesentlich von Null verschieden ist, so langsam variiert, daß wir sie in dem betrachteten q -Bereich konstant gleich F_0 annehmen dürfen. Dies gilt dann wegen der Totalsymmetrie von F in allen bei Teilchenvertauschungen entstehenden q -Bereichen, in welchen ϕ_0 wesentlich von Null verschieden ist. Über das Verhalten von F im q -Raum außerhalb dieser Bereiche braucht nichts vorausgesetzt zu werden. - Dann ist im Rahmen dieser Näherung

$$\langle \phi_0 | F | \phi_0 \rangle \approx \langle \phi_0 | F_0 | \phi_0 \rangle = F_0 ,$$

und für den Erwartungswert des Produkts von F mit einer beliebigen Funktion $G(\underline{r}_1', \dots, \underline{r}_N')$ erhält man

$$\begin{aligned} \langle \phi_0 | F \cdot G | \phi_0 \rangle &= \langle \phi_0 | F G | \phi_0 \rangle = E_0 \langle \phi_0 | G | \phi_0 \rangle \\ (A, III, 6) \quad &= \langle \phi_0 | F | \phi_0 \rangle \cdot \langle \phi_0 | G | \phi_0 \rangle. \end{aligned}$$

D.h. der Erwartungswert des Produkts einer totalsymmetrischen Funktion der Teilchenkoordinaten, welche die obigen Voraussetzungen erfüllt, mit einer beliebigen Funktion der Teilchenkoordinaten ist gleich dem Produkt der Erwartungswerte. Der hier getroffenen Voraussetzung bezüglich $\phi_0(q)$ liegt folgendes qualitatives Argument zugrunde.

Da die Dichte in einem Atomkern in etwa konstant ist, kann man sich zunächst den Kern in N gleich große Zellen eingeteilt denken, in denen im Mittel genau ein Teilchen zu finden ist. Da wir es außerdem bei einem Atomkern mit einem System aus Fermiteilchen zu tun haben, können (solange wir von Spin und Isospin absehen) zwei Nukleonen aufgrund des Pauliprinzipi niemals den gleichen Ort einnehmen. Die Schwankung der Teilchenzahl innerhalb der Zellen ist daher relativ gering. Das Absolutquadrat der Wellenfunktion kann deshalb nur für solche Werte von q 's wesentlich von Null verschieden sein, die Konfigurationen entsprechen, bei denen sich je ein Teilchen innerhalb der Einheitszellen aufhält. Diese Werte von q 's finden sich daher im q -Raum innerhalb relativ begrenzter q -Bereiche, welche durch Permutationen der Teilchen auseinander hervorgehen.

Eine in Anhang D.I. durchgeführte Kontrollrechnung wird dieses qualitative Argument unterstützen.

Unter den obigen Voraussetzungen lassen sich die Erwartungswerte der durch (A,III,5) gegebenen Ausdrücke für $\Theta_{\xi\xi}^{-1}$, $\Theta_{\eta\eta}^{-1}$ mit der Grundzustandswellenfunktion vereinfachen.

An die Bestimmungsfunktionen S_1, S_2 der körperfesten $\mathcal{J}$ -Achse muß die Forderung gestellt werden, unter Teilchenvertauschungen invariant zu sein; andernfalls würde eine Permutation der Teilchen die Lage der körperfesten $\mathcal{J}$ -Achse verändern, obwohl die räumliche Anordnung der Teilchen nach dieser Permutation dieselbe wie vorher ist.

Mit S_1, S_2 sind dann auch $L_x, S_1, L_x, S_2, L_y, S_1, L_y, S_2$ totalsymmetrische Funktionen der Teilchenkoordinaten, und wir finden unter mehrfacher Anwendung der Beziehung (A,III,6):^{*)}

$$(A,III,7a) \quad \langle \phi_0 | \Theta_{\xi\xi}^{-1} | \phi_0 \rangle = \frac{\langle \phi_0 | \sum_{i=1}^N (\langle L_y, S_2 \rangle \tilde{\nabla}_i S_1 - \langle L_y, S_1 \rangle \tilde{\nabla}_i S_2)^2 | \phi_0 \rangle}{m \cdot (\langle L_x, S_1 \rangle \langle L_y, S_2 \rangle - \langle L_y, S_1 \rangle \langle L_x, S_2 \rangle)^2},$$

$$(A,III,7b) \quad \langle \phi_0 | \Theta_{\eta\eta}^{-1} | \phi_0 \rangle = \frac{\langle \phi_0 | \sum_{i=1}^N (\langle L_x, S_1 \rangle \tilde{\nabla}_i S_2 - \langle L_x, S_2 \rangle \tilde{\nabla}_i S_1)^2 | \phi_0 \rangle}{m \cdot (\langle L_x, S_1 \rangle \langle L_y, S_2 \rangle - \langle L_y, S_1 \rangle \langle L_x, S_2 \rangle)^2}.$$

*)

Von L_x, S_1 und den analog gebildeten Ausdrücken haben wir dabei angenommen, daß sie hinreichend langsam veränderlich sind, so daß die Beziehung (A,III,6) anwendbar ist. Bezüglich der Veränderlichkeit der (nicht totalsymmetrischen) Ausdrücke $\tilde{\nabla}_i S_1, \tilde{\nabla}_i S_2$ braucht dagegen nichts vorausgesetzt werden.

Dabei haben wir zur Abkürzung $\langle \phi_0 | L_{x'} S_1 | \phi_0 \rangle = \langle L_{x'} S_1 \rangle$ usw. gesetzt.

Zu einer weiteren Vereinfachung gelangen wir, wenn wir die Freiheit ausnützen, daß mit (A,III,5) auch die obigen Ausdrücke (A,III,7) unter nichtsingulären Transformationen der Bestimmungsfunktionen S_1, S_2 invariant sind. Diese Freiheit erlaubt es, S_1 und S_2 stets so zu wählen, daß die Nebenbedingungen

$$(A,III,8) \quad \begin{aligned} \langle L_{x'} S_1 \rangle &= 1 & \langle L_{y'} S_1 \rangle &= 0 \\ \langle L_{x'} S_2 \rangle &= 0 & \langle L_{y'} S_2 \rangle &= 1 \end{aligned}$$

erfüllt sind. Sind nämlich $\bar{S}_1, \bar{S}_2$ zwei Funktionen, die die körpergebundene γ -Achse durch $\bar{S}_1 = 0, \bar{S}_2 = 0$ festlegen, aber den Nebenbedingungen nicht genügen, so gehe man über zu den äquivalenten Bestimmungsfunktionen

$$(A,III,9) \quad \begin{aligned} S_1 &= \frac{\langle L_{y'} \bar{S}_2 \rangle \bar{S}_1 - \langle L_{y'} \bar{S}_1 \rangle \bar{S}_2}{\langle L_{x'} \bar{S}_1 \rangle \langle L_{y'} \bar{S}_2 \rangle - \langle L_{y'} \bar{S}_1 \rangle \langle L_{x'} \bar{S}_2 \rangle} \\ S_2 &= \frac{-\langle L_{x'} \bar{S}_2 \rangle \bar{S}_1 + \langle L_{x'} \bar{S}_1 \rangle \bar{S}_2}{\langle L_{x'} \bar{S}_1 \rangle \langle L_{y'} \bar{S}_2 \rangle - \langle L_{y'} \bar{S}_1 \rangle \langle L_{x'} \bar{S}_2 \rangle} \end{aligned}$$

welche die Nebenbedingungen (A,III,8) erfüllen.

Die Ausdrücke für S_1, S_2 sind dabei wohldefiniert, da der Fall, daß der Nenner in (A,III,9) gleich Null wird, im Rahmen unserer Überlegungen nicht sinnvoll ist. Dann wäre nämlich das Gleichungssystem (A,III,3,4) zur Bestimmung der

Nachführungswinkel $\delta\phi_{\xi}, \delta\phi_{\eta}$ für die Konfigurationen, für die $\phi_0(q)$ wesentlich von Null verschieden ist, nicht lösbar. S_1, S_2 wären für diese Konfigurationen nicht in der Lage, die körpergebundene ζ -Achse nachzuführen.

Die Bedeutung der Nebenbedingungen (A,III,8) ersieht man ebenfalls aus dem Gleichungssystem (A,III,3,4). Für alle in $\phi_0(q)$ enthaltenen Konfigurationen, für die $\phi_0(q)$ wesentlich von Null verschieden ist, erhält man aus (A,III,3,4) zusammen mit den Nebenbedingungen (A,III,8):

$$\begin{aligned} \langle L_{x'} S_1 \rangle \delta\phi_{\xi} + \Delta_a^i e_a \cdot \tilde{\nabla}_i S_1 &= 0 \\ \langle L_{y'} S_2 \rangle \delta\phi_{\eta} + \Delta_a^i e_a \cdot \tilde{\nabla}_i S_2 &= 0, \end{aligned}$$

d.h.: Für die Nachführung durch Drehung um die ξ -Achse ist allein S_1 maßgeblich, für die Nachführung durch Drehung um die η -Achse ist allein S_2 maßgeblich.

Für die Bestimmungsfunktionen S_1, S_2 , die den Nebenbedingungen (A,III,8) genügen, lauten die Erwartungswerte von $\theta_{\xi\xi}^{-1}, \theta_{\eta\eta}^{-1}$ nunmehr (vgl. (A,III,7)):

$$\begin{aligned} \langle \phi_0 | \theta_{\xi\xi}^{-1} | \phi_0 \rangle &= \frac{1}{m} \langle \phi_0 | \sum_{i=1}^N (\tilde{\nabla}_i S_1)^2 | \phi_0 \rangle \\ \langle \phi_0 | \theta_{\eta\eta}^{-1} | \phi_0 \rangle &= \frac{1}{m} \langle \phi_0 | \sum_{i=1}^N (\tilde{\nabla}_i S_2)^2 | \phi_0 \rangle. \end{aligned}$$

Schreiben wir dabei den Operator $\tilde{\nabla}_i$ wieder aus,

$$\begin{aligned} \tilde{\nabla}_i &= \nabla_{\underline{r}_i'} - \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \nabla_{\underline{r}_j'} = \nabla_{\underline{r}_i'} - \frac{1}{N} \underline{P}' \\ (\underline{P}' &= \sum_{i=1}^N \nabla_{\underline{r}_i'} \text{ formal der Operator des Schwerpunktsimpulses in den } \underline{r}_i' \text{-Koordinaten}), \end{aligned}$$

so finden wir:

$$(A, III, 10a) \langle \phi_0 | \Theta_{\xi\xi}^{-1} | \phi_0 \rangle = \frac{1}{m} \langle \phi_0 | \sum_{i=1}^N (\tilde{\nabla}_{\underline{r}_i} S_1)^2 - \frac{1}{N} (P' S_1)^2 | \phi_0 \rangle$$

$$(A, III, 10b) \langle \phi_0 | \Theta_{\eta\eta}^{-1} | \phi_0 \rangle = \frac{1}{m} \langle \phi_0 | \sum_{i=1}^N (\tilde{\nabla}_{\underline{r}_i} S_2)^2 - \frac{1}{N} (P' S_2)^2 | \phi_0 \rangle.$$

Es ergibt sich somit eine wesentliche Vereinfachung gegenüber den Ausdrücken (A, III, 7). -

Der im weiteren von uns beschrittene Weg geht von der zusätzlichen Annahme aus, daß die Bestimmungsfunktionen S_1, S_2 so beschaffen sind, daß für genügend große Teilchenzahl die Schwerpunktsterme $\langle \phi_0 | \frac{1}{N} (P' S_1)^2 | \phi_0 \rangle$ und $\langle \phi_0 | \frac{1}{N} (P' S_2)^2 | \phi_0 \rangle$ in den obigen Ausdrücken nur Korrekturen höherer Ordnung bedeuten und daher vernachlässigt werden können.

Die anfangs gestellte Aufgabe, mit Hilfe des Extremalprinzips Funktionen S_1, S_2 zu ermitteln, die eine körpergebundene γ -Achse so definieren, daß spezifische Entkopplung vorliegt, stellt sich somit wie folgt dar:

Man bestimme das Minimum des Funktionals $\langle \Theta^{-1} \rangle$,

$$(A, III, 11) \langle \Theta^{-1} \rangle = \langle \phi_0 | \sum_{i=1}^N [(\nabla_{\underline{r}_i} S_1)^2 + (\nabla_{\underline{r}_i} S_2)^2] | \phi_0 \rangle \stackrel{!}{=} \min.,$$

unter den Nebenbedingungen

$$(A, III, 12) \langle \phi_0 | L_{x'} S_1 | \phi_0 \rangle = 1 \quad \langle \phi_0 | L_{y'} S_1 | \phi_0 \rangle = 0$$

$$(A, III, 13) \langle \phi_0 | L_{x'} S_2 | \phi_0 \rangle = 0 \quad \langle \phi_0 | L_{y'} S_2 | \phi_0 \rangle = 1$$

bei fest vorgegebener Grundzustandswellenfunktion $\phi_0(q)$.

Wir fassen die in diesem Abschnitt bezüglich der Funktionen S_1, S_2 getroffenen Voraussetzungen, welche zu dieser Form des Extremalprinzips geführt haben, noch einmal zusammen:

a) S_1 und S_2 sowie deren Ableitungen sind in den q -Bereichen, in denen $\phi_0(q)$ wesentlich von Null verschieden ist, hinreichend langsam veränderlich.

b) Die in (A,III,10) auftretenden Schwerpunktsterme können vernachlässigt werden.-

Diese Voraussetzungen bedeuten eine Einschränkung der Allgemeinheit jedoch nur insofern, als die L ö s u n g e n des Extremalprinzips diesen Voraussetzungen genügen müssen.

(Inbesondere wird es nach dem Auffinden der Lösungen nötig sein, das Vorliegen der obigen Voraussetzungen zu verifizieren)*)

Der Hilbertraum der Funktionen S_1, S_2 dagegen, in welchem das Funktional $\langle \Theta^{-1} \rangle$ unter den Nebenbedingungen $\langle L_x S_1 \rangle = 1$ usw. zu minimalisieren ist, erfährt dadurch keinerlei Beschränkung.

*)

Für die rechnerische Überprüfung der mehr qualitativen Voraussetzung a) genügt es dabei, wie unsere Herleitung zeigt, die Gültigkeit der Produktbeziehungen $\langle (L_x S_1)^2 (L_y S_2)^2 \rangle = \langle L_x S_1 \rangle^2 \langle L_y S_2 \rangle^2$ usw., welche bei den Gleichungen (A,III,7a,b) vorausgesetzt wurden, für die Lösungen zu verifizieren.

Bevor wir mit der Lösung des umseitig formulierten mathematischen Problems beginnen können, ist es notwendig, Methoden zu entwickeln, mit denen man die in den Beziehungen (A,III,11) ff. auftretenden Erwartungswerte von Funktionen der $\underline{r}'$ - Koordinaten mit einer Grundzustandswellenfunktion $\phi_0(q)$ praktisch berechnen kann.

Dies wird im folgenden Kapitel mit Hilfe des Konzepts intrinsischer Dichten geschehen.

IV. Das Konzept intrinsischer Dichten (Berechnung von Erwartungswerten mit Hilfe intrinsischer Dichten)

1. Vorbemerkung

Beim Eingehen in das Extremalprinzip, wie es in Gleichung (A.III,11) formuliert ist, erweist es sich als notwendig, Erwartungswerte von Funktionen, die von den $3N$ redundanten Variablen $\underline{r}'$ abhängen, mit der Grundzustandswellenfunktion ϕ_0 auszurechnen, welche von den $3N-6$ inneren Koordinaten q abhängt. Da die Koordinaten $\underline{r}'$ invariant sind unter Translationen und Drehungen des Teilchensystems in einem raumfesten Bezugssystem, können die $\underline{r}'$ -Koordinaten allein von den translations- und rotationsinvarianten inneren Koordinaten q abhängen: $\underline{r}' = \underline{r}'(q)$. Während dabei zur Umrechnung $\underline{r}' \longrightarrow q$ die Kenntnis der speziellen Definition der inneren Koordinaten hinreichend ist, benötigt man zur Umrechnung $q \longrightarrow \underline{r}'$ darüber hinaus noch die Definition des körpergebundenen Koordinatensystems in eine gegebene Konfiguration. Dieser Sachverhalt ist in Fig.2 am Beispiel des Dreikörperproblems erläutert (siehe Seite 34).

Die Erwartungswerte vom Typ $\langle \phi_0 | F(\underline{r}') | \phi_0 \rangle$ können somit, wenn die Definition der inneren Koordinaten, die Definition des körpergebundenen Systems, und die Wellenfunktion $\phi_0(q)$ gegeben sind, ermittelt werden, indem man die $\underline{r}'$ -Koordinaten auf innere Koordinaten umrechnet und dann die q -Integration ausführt:

$$\langle \phi_0 | F(\underline{r}') | \phi_0 \rangle = \int |\phi_0(q)|^2 F(\underline{r}'(q)) d\tau_q .$$

Dabei bedeutet $d\tau_q$ das invariante Volumenelement in den q -Koordinaten ($d\tau_q = \sqrt{g(q)} dq_1 \dots dq_{3N-6}$).

Eine Berechnung des Erwartungswertes auf diese Weise ist jedoch bei Systemen mit einer Teilchenanzahl von der Größenordnung 100 oder größer, wie wir sie betrachten, praktisch verwehrt, da zum einen Grundzustandswellenfunktionen $\phi_0(q)$ für Teilchensysteme der betrachteten Art niemals exakt bekannt sind, zum anderen aber die Definition der inneren Koordinaten die Rechnung ohnedies völlig unübersichtlich gestalten würde. Wir wollen daher im folgenden untersuchen, wie sich die Berechnung von Erwartungswerten vom genannten Typ zumindest in den Fällen, in denen $F(\underline{r}')$ ein speziell angesetzter N -Teilchenoperator ist, ohne die Kenntnis der vollen Wellenfunktion nur mit Hilfe von inneren Ein- oder Mehrteilchendichten bewerkstelligen läßt.

Fig. 2a

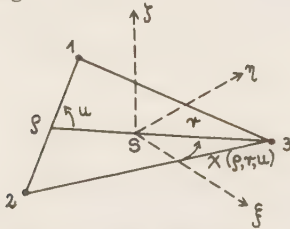


Fig. 2b

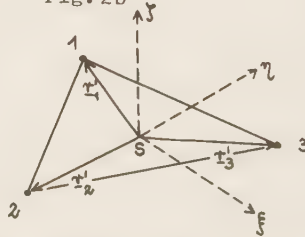


Fig. 2 : Zur Äquivalenz von Koordinaten $\underline{r}'$ und inneren Koordinaten q . (Innere Koordinaten hier: ρ, r, u , Definition des körpergebundenen Koordinatensystems wie in Fig. 2a angegeben).

- a) Bei vorgegebenen inneren Koordinaten ρ, r, u und zusätzlich vorgegebenem inneren Bezugssystem lassen sich die $\underline{r}'_i$ ermitteln.
 b) Vorgegebene $\underline{r}'_1, \underline{r}'_2, \underline{r}'_3$ sind hinreichend zur eindeutigen Bestimmung der inneren Koordinaten.

2. Innere Einteilchendichte

Wir betrachten in diesem Abschnitt zunächst den Fall, daß die Funktion $F(\underline{r}')$ ein (lokaler) Einteilchenoperator in den Koordinaten $\underline{r}'_1$ ist:

$$(A, IV, 1) \quad F(\underline{r}'_1, \dots, \underline{r}'_N) = \sum_{i=1}^N f(\underline{r}'_i),$$

und fragen nach

$$\langle \phi_0 | F | \phi_0 \rangle = \int |\phi_0(q)|^2 \sum_{i=1}^N f(\underline{r}'_i) d\tau_q.$$

Aus einer gegebenen Grundzustandswellenfunktion $\phi_0(q)$ können wir die "innere Einteilchendichte" gewinnen als Erwartungswert des Einteilchendichteoperators $\hat{\mathcal{G}}_1(\underline{r}')$,

$$\hat{\mathcal{G}}_1(\underline{r}') = \sum_{i=1}^N \delta(\underline{r}' - \underline{r}'_i),$$

mit $\phi_0(q)$:

$$(A, IV, 2) \quad \mathcal{G}_1(\underline{r}') = \langle \phi_0 | \hat{\mathcal{G}}_1(\underline{r}') | \phi_0 \rangle = \int |\phi_0(q)|^2 \sum_{i=1}^N \delta(\underline{r}' - \underline{r}'_i(q)) d\tau_q,$$

wobei wir bei der q -Integration uns die im Argument der δ -Funktion auftretenden Koordinaten $\underline{r}'_1$ wiederum durch innere Koordinaten ausgedrückt denken.

Ihrer Definition nach gibt $\mathcal{G}_1(\underline{r}')$ an, wie die Teilchendichte vom körperfesten Bezugssystem aus betrachtet aussieht.

Nun ist

$$\begin{aligned} \int \mathcal{G}_1(\underline{r}') f(\underline{r}') d^3 \underline{r}' &= \int |\phi_0(q)|^2 \sum_{i=1}^N \delta(\underline{r}' - \underline{r}'_i(q)) f(\underline{r}') d^3 \underline{r}' d\tau_q \\ &= \int |\phi_0(q)|^2 \sum_{i=1}^N f(\underline{r}'_i(q)) d\tau_q, \end{aligned}$$

da die $\underline{r}'$ -Integration wegen der δ -Funktion nur Beiträge für $\underline{r}' = \underline{r}'_1(q)$ ($i = 1, \dots, N$) liefert. Wir finden also

$$(A, IV, 3) \quad \langle \phi_0 | F | \phi_0 \rangle = \langle \phi_0 | \sum_{i=1}^N f(\underline{r}'_i) | \phi_0 \rangle = \int G_1(\underline{r}') f(\underline{r}') d\underline{r}',$$

Die Berechnung des Erwartungswertes des Einteilchenoperators F von (A, IV, 1) reduziert sich somit auf die Berechnung eines Integrals, in dem nur über die drei Freiheitsgrade der Variablen $\underline{r}'$ integriert wird.

Aufgrund unserer Herleitung scheint für die praktische Berechnung von $\langle \phi_0 | F | \phi_0 \rangle$ zunächst nichts gewonnen, da das Problem im Grunde auf die Berechnung der Einteilchendichte $G_1(\underline{r}')$ gemäß (A, IV, 2) verschoben ist. Der Vorteil, den Begriff der inneren Einteilchendichte einzuführen, besteht jedoch darin, daß man für $G_1(\underline{r}')$ nun realistische Modelle ansetzen kann, welche gewissen physikalischen Eigenschaften der betrachteten Teilchensysteme wie etwa Deformation, räumliche Ausdehnung usw. Rechnung tragen. Die Vorstellung dabei ist, daß diesen Modelldichten letztlich innere Wellenfunktionen $\phi_0(q)$ zugrundeliegen.

Ausgehend von einer Modelldichte $G_1(\underline{r}')$ kann man dann gemäß (A, IV, 3) die Erwartungswerte von lokalen Einteilchenoperatoren in den $\underline{r}'_1$ -Koordinaten auf eine dreidimensionale Integration, z.B. in kartesischen Koordinaten, zurückführen, ohne sich um die Redundanz der Variablen $\underline{r}'_1$ kümmern zu müssen. Man benötigt dazu weder die innere Wellenfunktion $\phi_0(q)$ noch die Kenntnis der speziellen Definition der in der Wellenfunktion verwendeten inneren Koordinaten q .

3. Beispiel zur inneren Einteilchendichte

Wir wollen die im vorhergehenden Abschnitt erläuterten Sachverhalte an einem zweidimensionalen Beispiel verdeutlichen.

Wir betrachten zwei Teilchen, die sich in der XY-Ebene auf einem Kreis von Radius a bewegen können (siehe Fig.3). Die zwei Freiheitsgrade des Systems können raumfest beschrieben werden durch Winkel φ_1, φ_2 . Wir führen nun innere und kollektive Koordinaten ein. Innere Koordinate sei der Abstandswinkel χ der beiden Teilchen, $\chi = |\varphi_1 - \varphi_2|$ ($\chi \in [0, \pi]$), kollektive Koordinate sei der Winkel α zwischen der raumfesten X - und der körperfesten ξ - Achse. Wir definieren die letztere als die Winkelhalbierende, also $\alpha = \frac{1}{2}(\varphi_1 + \varphi_2)$ ($\alpha \in [0, 2\pi]$). Auf die ξ - Achse bezogen haben die Teilchen die Winkelkoordinaten φ'_1, φ'_2 .*)

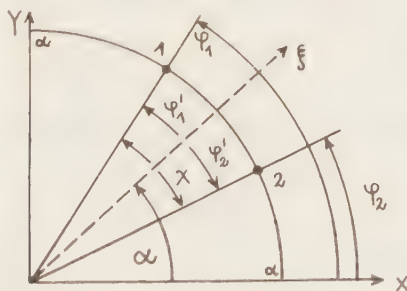


Fig. 3: Zweidimensionales Beispiel zur Einteilchendichte, Erläuterung im Text.

*)

Die "Bestimmungsgleichung" für die Definition der körperfesten ξ - Achse lautet in diesem Fall $\alpha(\varphi'_1, \varphi'_2) = \frac{1}{2}(\varphi'_1 + \varphi'_2) = 0$.

Die innere Einteilchendichte berechnet sich dann nach (A, IV, 2) wie folgt:

$$\begin{aligned}\sigma_1(\varphi') &= \int_0^{\pi} |\phi_0(x)|^2 \cdot (\delta(\varphi' - \varphi'_1(x)) + \delta(\varphi' - \varphi'_2(x))) dx \\ &= \int_0^{\pi} |\phi_0(x)|^2 \left(\delta\left(\varphi' - \frac{x}{2}\right) + \delta\left(\varphi' + \frac{x}{2}\right) \right) dx \\ &= |\phi_0(2\varphi')|^2 + |\phi_0(-2\varphi')|^2.\end{aligned}$$

Dieses Resultat ergibt sich jedoch nur für $\varphi' \in \left[-\frac{\pi}{2}, +\frac{\pi}{2}\right]$.

Für die φ' -Werte aus $[-\pi, +\pi]$, welche außerhalb dieses Intervalls liegen, liefert das obige Integral keinen Beitrag, dort wird also $\sigma_1(\varphi') = 0$.

Geben wir uns als innere Wellenfunktion $\phi_0(x)$ z.B. speziell (unnormiert) $\phi_0(x) = \sin x$ vor (siehe Fig. 4a), so erhalten wir

$$\sigma_1(\varphi') = \begin{cases} 2 \sin^2 2\varphi' & \varphi' \in \left[-\frac{\pi}{2}, +\frac{\pi}{2}\right] \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Diese Einteilchendichte ist in Fig. 4b dargestellt.

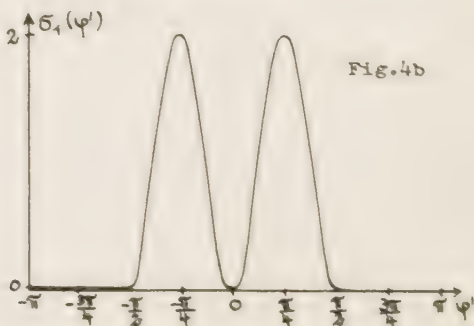
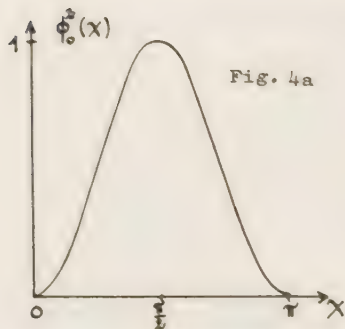


Fig. 4: Eine spezielle innere Wellenfunktion (4a) und die zugehörige innere Einteilchendichte (4b).

Wir berechnen nun für dieses Beispiel den Erwartungswert $\langle \phi_0 | F | \phi_0 \rangle$ für den Einteilchenoperator $F(\varphi_1', \varphi_2') = \cos^2 2\varphi_1' + \cos^2 2\varphi_2'$, zunächst direkt:

$$\begin{aligned} \langle \phi_0 | F | \phi_0 \rangle &= \int_0^\pi \phi_0^2(x) F(\varphi_1'(x), \varphi_2'(x)) dx = \\ &= \int_0^\pi \sin^2 x \cdot 2 \cos^2 x dx = \frac{\pi}{4} , \end{aligned}$$

dann mit Hilfe der inneren Einteilchendichte:

$$\begin{aligned} \langle \phi_0 | F | \phi_0 \rangle &= \int_{-\pi}^{+\pi} G_1(\varphi') \cos^2 2\varphi' d\varphi' = \\ &= \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} 2 \sin^2 2\varphi' \cdot \cos^2 2\varphi' d\varphi' = \frac{\pi}{4} . \end{aligned}$$

Die allgemeine Gültigkeit der Beziehung (A, IV, 3) ist damit durch ein spezielles Beispiel veranschaulicht worden.

4. Innere Zwei- und Mehrteilchendichten

Aus einer gegebenen Grundzustandswellenfunktion $\phi_0(q)$ lassen sich neben der Einteilchendichte auch höhere Dichten gewinnen als Erwartungswerte der entsprechenden Dichteoperatoren mit ϕ_0 . Auf diese Weise erhält man die innere Zweiteilchendichte zu

$$\begin{aligned}\sigma_2(r, r') &= \langle \phi_0 | \sum_{i,j} \delta(r - r_i) \delta(r' - r_j) | \phi_0 \rangle \\ &= \int |\phi_0(q)|^2 \sum_{i,j} \delta(r - r_i(q)) \delta(r' - r_j(q)) dq\end{aligned}$$

die innere Dreiteilchendichte zu

$$\begin{aligned}\sigma_3(r, r', r'') &= \langle \phi_0 | \sum_{\substack{i,j,k \\ j+k}} \delta(r - r_i(q)) \delta(r' - r_j(q)) \delta(r'' - r_k(q)) | \phi_0 \rangle \\ &= \int |\phi_0(q)|^2 \sum_{\substack{i,j,k \\ j+k}} \delta(r - r_i(q)) \delta(r' - r_j(q)) \delta(r'' - r_k(q)) dq\end{aligned}$$

usw. die höheren Dichten.

Aufgrund ihrer Definition bestehen zwischen $\sigma_2(r')$, $\sigma_2(r', r'')$ und $\sigma_3(r', r'', r''')$ die Beziehungen

$$\begin{aligned}\int \sigma_2(r, r', r'') d^3 r'' &= (N-2) \sigma_2(r, r') \\ \int \sigma_2(r', r'') d^3 r'' &= (N-1) \sigma_1(r')\end{aligned}$$

Allgemein hängen die n - und die $(n-1)$ - Teilchendichten zusammen gemäß

$$(A, IV, +) \quad \int \sigma_n(r^{(1)}, \dots, r^{(n)}) d^3 r^{(n)} = (N-n+1) \sigma_{n-1}(r^{(1)}, \dots, r^{(n-1)})$$

Analog wie bei der Diskussion der Einteilchendichte ergibt sich für die Erwartungswerte lokaler Zweiteilchenoperatoren in den Koordinaten $\underline{r}'_1, \underline{r}'_2, \dots, \underline{r}'_N = \sum_{i \neq j} f(\underline{r}'_i, \underline{r}'_j)$ mit der Grundzustandswellenfunktion:

$$(A, IV, 5) \quad \langle \phi_0 | F | \phi_0 \rangle = \int \sigma_2(\underline{r}', \underline{r}'') f(\underline{r}', \underline{r}'') d^3 \underline{r}' d^3 \underline{r}''.$$

Für lokale Dreiteilchenoperatoren in den $\underline{r}'_1$ -Koordinaten

$$G(\underline{r}'_1, \dots, \underline{r}'_N) = \sum_{i \neq j, j \neq k, k \neq i} g(\underline{r}'_i, \underline{r}'_j, \underline{r}'_k)$$

erhält man

$$(A, IV, 6) \quad \langle \phi_0 | G | \phi_0 \rangle = \int \sigma_3(\underline{r}', \underline{r}'', \underline{r}''') g(\underline{r}', \underline{r}'', \underline{r}''') d^3 \underline{r}' d^3 \underline{r}'' d^3 \underline{r}''',$$

usw. für Operatoren höherer Ordnung.

Die Vorteile der Berechnung der Erwartungswerte von Zwei-, Drei- und Mehrteilchenoperatoren gemäß den Gleichungen

(A, IV, 5, 6) sind dieselben wie im Fall der Einteilchendichte:

- a) Man kann sich Modelldichten konstruieren, welche die physikalischen Eigenschaften der betrachteten Systeme widerspiegeln (bei der Zweiteilchendichte etwa die Art der ins Auge gefaßten Zweiteilchenkorrelationen).
- b) Man benötigt weder eine innere Wellenfunktion $\phi_0(q)$ noch die Kenntnis der Definition der darin verwendeten inneren Koordinaten. ^{*)}

*)

Die Unsicherheit im Ansatz für die Wellenfunktion überträgt sich allerdings bis zu einem gewissen Grad auf eine Unsicherheit im Ansatz für die Dichten.

c) Statt einer komplizierten Integration über innere Koordinaten hat man es in (A,IV,5,6) mit "üblichen" Volumenintegralen zu tun, ohne sich um die Redundanz der Variablen $\underline{r}_i$ kümmern zu müssen. -

Das in diesem Kapitel entwickelte Konzept innerer Dichten wird im folgenden bei der Anwendung des Extremalprinzips der spezifischen Entkopplung in der Form (A,III,11) mit Vorteil benutzt werden.

V. Lösungsidee

In den vorhergehenden Kapiteln ist das Extremalprinzip der spezifischen Entkopplung auf eine Form gebracht worden, in welcher es die Bestimmungsfunktionen S_1, S_2 bzw. deren Ableitungen explizit enthält, die Bestimmungsfunktionen der spezifisch entkoppelnden $\mathcal{J}$ -Achse hieraus also durch Variation nach S_1 und S_2 ermittelt werden können. Außerdem haben wir mit dem Konzept intrinsischer Dichten eine Methode entwickelt, die es gestattet, die bei der Anwendung des Extremalprinzips notwendigen Integrale über die inneren Freiheitsgrade auszuwerten.

Damit sind alle Hilfsmittel vorgegeben, um das Extremalprinzip der spezifischen Entkopplung in seiner Form (A,III,11) einer mathematischen Lösung zuzuführen.

Die Lösungsidee ist nun die folgende. Wir denken uns die Funktionen S_1 und S_2 entwickelt nach reinen Einteilchen-, Zweiteilchen- und sonstigen Mehrteilchentermen:

$$\begin{aligned} S_1 &= \sum_i s_1(i) + \sum_{i \neq j} t_1(i, j) + \dots \\ S_2 &= \sum_i s_2(i) + \sum_{i \neq j} t_2(i, j) + \dots \end{aligned}$$

(A,V,1)

Einteilchenterm + Zweiteilchenterm + ...

*)
Wegen der Ununterscheidbarkeit der Teilchen ist es nicht notwendig, die in den Summengliedern stehenden Funktionen von der Teilchennumerierung abhängen zu lassen.

Dann ist klar, daß beim Einteilchenterm der Beitrag von Teilchen i zur Definition der körpergebundenen γ -Achse unabhängig davon ist, wo sich die restlichen Teilchen befinden, während beim Zweiteilchenterm dieser Beitrag davon abhängt, wo die übrigen Teilchen sind.

Eine Entwicklung bis zu Zweiteilchentermen, wie wir sie in dieser Arbeit durchführen werden, entspricht daher einer Mitnahme von Zweiteilchenkorrelationen hinsichtlich der Definition des körpergebundenen Koordinatensystems. Da sich im allgemeinen die wesentlichen Eigenschaften von Atomkernen aus Zweiteilchenkorrelationen erklären lassen und höhere Korrelationen vernachlässigt werden können, sollte die von uns angestellte Entwicklung bis zu Zweiteilchentermen eine gute Approximation der vollständigen Lösung darstellen.

In der Literatur wird der Begriff der Zweiteilchenkorrelation allerdings im allgemeinen im Sinne einer durch Potentiale vermittelten Zweiteilchenwechselwirkung verstanden. Wir bemerken ausdrücklich, daß der Begriff der Zweiteilchenkorrelation, so wie wir ihn verwenden, in einer anderen Bedeutung gebraucht wird.

Im Sinne eines iterativen Vorgehens werden wir in Teil B zunächst den Fall untersuchen, daß in der Entwicklung $(A, V, 1)$ nur Einteilchenterme berücksichtigt werden (Einteilchenansatz). In Teil C wird dann die Mitnahme der Zweiteilchenterme erfolgen (Zweiteilchenansatz).

Bevor wir zur Durchführung dieser Ansätze übergehen, wollen wir bereits an dieser Stelle die Frage erörtern, für welche Teilchensysteme der jeweilige Ansatz überhaupt physikalisch sinnvoll ist.

Zu diesem Zweck stellen wir zunächst noch einmal gegenüber den üblichen Begriff der Korrelation in einer Wellenfunktion zu derjenigen Korrelation, welche durch die Funktionen S_1 , S_2 zum Ausdruck gebracht wird.

Die Korrelation in einer Wellenfunktion kommt zustande durch Wechselwirkungskräfte, (beispielsweise in der Art, daß kleine Teilchenabstände bevorzugt werden). Konfigurationen dieser Art werden in diesem Fall daher bei der Berechnung des effektiven Trägheitsmoments ($sh.(A,III,11)$) mit stärkerem Gewicht beitragen als andere. Für die Durchführung des Einteilchenansatzes wird sich nur die Einteilchendichte als nötig erweisen. Es ist aber klar, daß Rechnungen, die nur die Einteilchendichte benötigen, die genannten Korrelationen nicht zum Ausdruck bringen können. Dazu müßte mindestens die Zweiteilchendichte herangezogen werden.

Korrelationen innerhalb unserer Bestimmungsfunktionen andererseits bewirken, daß beispielsweise die infinitesimale Verschiebung eines Teilchens eine stärkere Verlagerung des inneren Bezugssystems dann nach sich zieht, wenn sich ein weiteres Teilchen in unmittelbarer Nähe befindet. Diese Korrelationen können erst berücksichtigt werden, wenn man in den Bestimmungsfunktionen vom Einteilchen- zum Zweiteilchenansatz wei-

tergeht. Die Durchführung dieses Ansatzes wird zeigen, daß damit auch die Zweiteilchendichte in die Rechnung einbezogen werden wird.

Aus dem Gesagten ergibt sich, daß Korrelationen innerhalb der Wellenfunktion sich nur dann auf die Lösung des Extremalprinzips auswirken können, wenn zugleich im Ansatz für die Definition des körpergebundenen Koordinatensystems Korrelationen innerhalb der entsprechenden Bestimmungsfunktionen berücksichtigt sind.

Hieraus folgt aber, daß der Einteilchenansatz, welcher keine Korrelationen in den Bestimmungsfunktionen beinhaltet, nicht sinnvoll ist für Systeme, in welchen die Teilchen durch Wechselwirkungskräfte korreliert sind. Als Anwendungsbereich für einen solchen Ansatz verbleiben höchstens Systeme, in denen die Teilchen durch Kräfte in einem gemeinsamen Potentialfeld, z.B. dem eines als fest gedachten Zentrums, gebunden sind.

Die Betrachtung des Einteilchenansatzes erscheint daher physikalisch sinnvoll allein für Systeme "unabhängiger" Teilchen, genauer: unabhängiger Bosonen, da bei unabhängigen Fermionen immer noch die Korrelation der Teilchen über das Pauliprinzip vorliegt, diese also nicht unabhängig sind in dem für den Einteilchenansatz erforderlichen Sinne.

Für den Zweiteilchenansatz ergeben sich dagegen aus dem Gesagten keinerlei Einschränkungen hinsichtlich seiner Anwendbarkeit. Vielmehr ist mindestens ein Zweiteilchenansatz

erforderlich für Systeme wechselwirkender Fermionen und damit auch für die von uns speziell ins Auge gefaßten deformierten Atomkerne.

Wenn wir dennoch im folgenden zunächst den Einteilchenansatz behandeln, so deswegen, weil sich die im Zusammenhang mit der Lösung des Extremalprinzips der spezifischen Entkoppelung auftretenden Probleme daran in übersichtlicher Weise diskutieren lassen.

Wir betonen jedoch an dieser Stelle ausdrücklich, daß wir uns bei der Durchführung des E i n t e i l c h e n a n s a t z e s stets Systeme wechselwirkungsfreier B o s o n e n zugrundegelegt denken werden.

Der Übergang auf die uns eigentlich interessierenden Systeme wechselwirkender F e r m i o n e n wird erst bei der Behandlung des Z w e i t e i l c h e n a n s a t z e s geschehen.

Teil B

Lösung des Extremalprinzips der spezifischen Entkopplung
für den Einteilchenansatz

I. Einteilchenansatz

Wir betrachten in diesem Teil den Einteilchenansatz für die Bestimmungsfunktionen S_1, S_2 der körpergebundenen ζ - Achse. S_1, S_2 haben also die Gestalt: *)

$$\begin{aligned} S_1 &= \sum_i s_1(\underline{r}_i) \\ S_2 &= \sum_i s_2(\underline{r}_i) \end{aligned}$$

Der Permutationsinvarianz der Funktionen S_1, S_2 ist dabei, wie in A.V. bereits erwähnt, dadurch Rechnung getragen, daß in diesem Ansatz für alle Teilchen i einheitliche Funktionen s_1, s_2 auftreten.

Gesucht sind diejenigen Einteilchenfunktionen $s_1(\underline{r}), s_2(\underline{r})$, welche das Extremalprinzip (A, III, 11) der spezifischen Entkopplung lösen. Dazu ermitteln wir im folgenden Abschnitt, in welcher mathematischen Form das Extremalprinzip von den Funktionen s_1, s_2 abhängt.

*)

Für die auf das gesuchte körpergebundene System bezogenen Teilchenkoordinaten, die in Teil A mit $\underline{r}'_i$ gekennzeichnet wurden, schreiben wir im weiteren nur $\underline{r}_i$ (ohne Strich).

II. Mathematische Form des Extremalprinzips für den Ein- chenansatz

Wir gehen aus vom Extremalprinzip der spezifischen Entkopp-
lung in seiner allgemeinen Formulierung (vgl. (A, III, 11) -
(A, III, 14)) und berechnen zunächst das Funktional $\langle \Theta^{-1} \rangle$
in Abhängigkeit von s_1, s_2 .

Nach (A, III, 11) ist

$$\langle \Theta^{-1} \rangle = \frac{1}{2m} \langle \phi_0 | \sum_{i=1}^N [(\nabla_{\mathbf{r}_i} S_1)^2 + (\nabla_{\mathbf{r}_i} S_2)^2] | \phi_0 \rangle.$$

Aus $S_1 = \sum_i s_1(\mathbf{r}_i)$ folgt: $\nabla_{\mathbf{r}_i} S_1 = \nabla s_1(\mathbf{r}_i)$. Daher wird

$$\langle \Theta^{-1} \rangle = \frac{1}{2m} \langle \phi_0 | \sum_{i=1}^N [(\nabla s_1(\mathbf{r}_i))^2 + (\nabla s_2(\mathbf{r}_i))^2] | \phi_0 \rangle.$$

Der im Bracket stehende Ausdruck ist ein lokaler Einteil-
chenoperator. Wir können den Erwartungswert daher nach (A, IV, 3)
zurückführen auf ein Integral über die intrinsische Einteil-
chendichte $\sigma_1(\mathbf{r})$ und erhalten:

$$(B, II, 1) \quad \langle \Theta^{-1} \rangle = \frac{1}{2m} \int \sigma_1(\mathbf{r}) [(\nabla s_1(\mathbf{r}))^2 + (\nabla s_2(\mathbf{r}))^2] d\mathbf{r}.$$

Für die Nebenbedingungen ergibt sich wegen

$$L_x S_1 = \left(\sum_j l_x(j) \right) \left(\sum_i s_1(i) \right) = \sum_i l_x(i) s_1(i)$$

analog

$$\langle \phi_0 | L_x S_1 | \phi_0 \rangle = \int \sigma_1(\mathbf{r}) l_x s_1(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \stackrel{!}{=} 1,$$

usw. die anderen Nebenbedingungen.

Das Extremalprinzip der spezifischen Entkopplung führt also beim Einteilchenansatz auf das folgende mathematische Problem:

Man minimiere das Funktional $\langle \Theta^{-1} \rangle$:

$$(B, II, 2) \quad \langle \Theta^{-1} \rangle = \frac{1}{2m} \int \sigma_1(\underline{r}) [(\nabla s_1)^2 + (\nabla s_2)^2] d\tau \stackrel{!}{=} \min,$$

unter den Nebenbedingungen:

$$(B, II, 3) \quad \begin{aligned} \int \sigma_1(\underline{r}) l_x s_1 d\tau &= 1 & \int \sigma_1(\underline{r}) l_x s_2 d\tau &= 0 \\ \int \sigma_1(\underline{r}) l_y s_1 d\tau &= 0 & \int \sigma_1(\underline{r}) l_y s_2 d\tau &= 1 \end{aligned}$$

bei fest vorgegebener intrinsischer Einteilchendichte $\sigma_1(\underline{r})$.

Wir bemerken, daß statt der Forderungen $\int \sigma_1(\underline{r}) l_x s_1 d\tau = \int \sigma_1(\underline{r}) l_y s_2 d\tau = 1$ auch die schwächeren Nebenbedingungen

$$(B, II, 4) \quad \begin{aligned} \int \sigma_1(\underline{r}) l_x s_1 d\tau &= \int \sigma_1(\underline{r}) l_y s_2 d\tau = \text{const.} \\ &(\text{beliebige, aber feste Konstante} \neq 0) \end{aligned}$$

genügen (vgl. (A, III, 7a, b)). Hat man die das Extremalprinzip lösenden Funktionen s_1, s_2 erhalten, so ergibt sich für das effektive Trägheitsmoment in diesem Fall

$$(B, II, 5) \quad \begin{aligned} \frac{1}{\Theta_{\text{eff}}} &= \frac{\frac{1}{2m} \int \sigma_1 [(\nabla s_1)^2 + (\nabla s_2)^2] d\tau}{\left(\int \sigma_1 l_x s_1 d\tau \right) \left(\int \sigma_1 l_y s_2 d\tau \right)} \\ &= \frac{\int \sigma_1 [(\nabla s_1)^2 + (\nabla s_2)^2] d\tau}{(\text{const.})^2} \end{aligned}$$

III. Mathematische Lösung des Extremalprinzips für gewisse Modelle der Einteilchendichte

1. Konstante Einteilchendichte

a) Motivation des Ansatzes

Um das in B.II. formulierte mathematische Problem lösen zu können, benötigen wir ein Modell für die in den Integralen auftretende intrinsische Einteilchendichte. Als Modell setzen wir an, daß σ_1 innerhalb eines Sphäroids mit der Oberfläche $r(\mathcal{V}) = R_0(1 + \beta Y_{2,0}(\mathcal{V}))$ (β der Deformationsparameter) konstant sein soll und außerhalb verschwindet:

$$\begin{aligned} \sigma_1(\underline{r}) &= \frac{N}{V} = \rho_0 = \text{const.} & r \leq R_0(1 + \beta Y_{2,0}(\mathcal{V})) \\ (B, III, 1) \quad \sigma_1(\underline{r}) &= 0 & \text{sonst.} \end{aligned}$$

(V stimmt bis auf Ordnungen β^2 und höher mit dem Volumen der Kugel vom Radius R_0 überein: $V = \frac{4\pi}{3} R_0^3 + o(\beta^2)$).

Mit diesem Ansatz ist berücksichtigt, daß wir deformierte Teilchensysteme beschreiben wollen, deren Einteilchendichte von dem gesuchten Koordinatensystem der spezifischen Entkopplung aus betrachtet Axialsymmetrie aufweist (vgl. Fußnote auf S. 14) *). Daß wir dabei zunächst von einer Ortsabhängigkeit der Einteilchendichte absehen und diese innerhalb eines

*)

Wir bemerken ausdrücklich, daß dies keine Vorwegnahme der Definition des spezifisch entkoppelnden Koordinatensystems bedeutet.

Sphäroids als konstant annehmen, geschieht im Sinne eines einfachen Ansatzes. Eine Erweiterung auf eine allgemeinere Klasse von deformierten Einteilchendichten wird in B.III.2. erfolgen.

Mit dem Modell (B,III,1) für σ_1 gehen wir nun in das in B.II. formulierte mathematische Problem zur Bestimmung der gesuchten Funktionen s_1, s_2 ein.

b) Mathematische Lösung des Extremalprinzips für das Modell konstanter Einteilchendichte

Der allgemeinste Ansatz für die reelle Funktion $s_1(\underline{r})$ läßt sich sicherlich wie folgt erfassen:

$$\begin{aligned} s_1(I) &= \sum_{l,m \geq 0} \left\{ f_{lm}(\tau) \cdot \frac{1}{2} (Y_{lm}(\vartheta, \varphi) + c.c.) + g_{lm}(\tau) \cdot \frac{1}{2i} (Y_{lm}(\vartheta, \varphi) - c.c.) \right\} \\ (B, III, 2) \quad &= \sum_{l,m \geq 0} \left\{ f_{lm}(\tau) \operatorname{Re} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) + g_{lm}(\tau) \operatorname{Im} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \right\} \end{aligned}$$

mit reellen Entwicklungsfunktionen $f_{lm}(r), g_{lm}(r)$.

Berechnet man für diesen Ansatz $\int \sigma_1 l_x s_1 d\tau$ (σ_1 wie in (B,III,1)), so ergibt sich nach einigen Rechenschritten:

$$(B, III, 3) \quad \int \sigma_1 l_x s_1 d\tau = g_{2,1}(R_0) \cdot R_0^3 \cdot \frac{\sqrt{6}}{2} \cdot \rho_0 \cdot \beta + o(\beta^2) .$$

Für $\int \sigma_1 l_y s_1 d\tau$ errechnet man:

$$(B, III, 4) \quad \int \sigma_1 l_y s_1 d\tau = -f_{2,1}(R_0) \cdot R_0^3 \cdot \frac{\sqrt{6}}{2} \cdot \rho_0 \cdot \beta + o(\beta^2) .$$

Die Integrale liefern also einen Wert ungleich Null frühestens in der Ordnung β^1 , und dieser Wert ist allein durch die Entwicklungsfunktionen $g_{2,1}$ bzw. $f_{2,1}$ bestimmt. - Da wir bei allen weiteren Überlegungen an der niedrigsten nichtverschwindenden Ordnung von β interessiert sind, können wir in (B,III,3) und (B,III,4) die Ordnungen β^2 vernachlässigen. Die Nebenbedingungen

$$\int \sigma_1 l_x s_1 dt = \text{const.} \neq 0, \quad \int \sigma_1 l_y s_1 dt = 0$$

führen dann zu den folgenden Randbedingungen für die Funktionen $f_{2,1}$, $g_{2,1}$ in der Entwicklung (B,III,2) von s_1 :

$$(B,III,5) \quad f_{2,1}(R_0) = 0$$

$$(B,III,6) \quad g_{2,1}(R_0) = C \quad (\neq 0).$$

Setzt man in derselben Weise für s_2 an

$$(B,III,7) \quad s_2(r) = \sum_{l,m \geq 0} \left\{ h_{lm}(r) \operatorname{Re} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) + k_{lm}(r) \operatorname{Im} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \right\},$$

so ergeben sich analog Randbedingungen für die Entwicklungsfunktionen $h_{2,1}$ und $k_{2,1}$:

$$(B,III,8) \quad h_{2,1}(r_0) = -C \quad (\neq 0)$$

$$(B,III,9) \quad k_{2,1}(R_0) = 0,$$

aber wie oben keine Einschränkungen für die übrigen Entwicklungsfunktionen.

Wir gehen nun mit den Ansätzen (B,III,2), (B,III,7) für s_1 , s_2 und (B,III,1) für σ_1 in das Extremalprinzip (B,II,2) ein.

Nach Ausführung der Winkelintegration ergibt sich:

$$\frac{1}{2m} \int \epsilon_1 [(\nabla s_1)^2 + (\nabla s_2)^2] d\tau = \frac{1}{4m} \cdot \rho_0 \cdot$$

$$\sum_{l,m \geq 0} \int dr r^2 \cdot \left[\left(f_{lm,r}^2 + \frac{l(l+1)}{r^2} f_{lm}^2 \right) + \left(g_{lm,r}^2 + \frac{l(l+1)}{r^2} g_{lm}^2 \right) \right.$$

$$\left. + \left(h_{lm,r}^2 + \frac{l(l+1)}{r^2} h_{lm}^2 \right) + \left(k_{lm,r}^2 + \frac{l(l+1)}{r^2} k_{lm}^2 \right) \right]$$

$$+ o(\beta) \stackrel{!}{=} \min. .$$

Wir betrachten wiederum nur die erste nichtverschwindende Ordnung von β und erhalten als Euler-Lagrange-Gleichungen:

$$(B, III, 10) \quad \frac{d^2}{dr^2} f_{lm}(r) + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} f_{lm}(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} f_{lm}(r) = 0$$

usw. (die entsprechenden Gleichungen für g_{lm} , h_{lm} , k_{lm} haben dieselbe Form).

Die Funktionen f_{lm} usw. müssen dabei den folgenden, aus dem obigen Extremalprinzip fließenden "natürlichen Randbedingungen" genügen:

$$(B, III, 11) \quad \lim_{r \rightarrow 0} r^2 \cdot f_{lm,r}(r) = 0 \quad (\text{für alle } l, m)$$

$$(B, III, 12) \quad f_{lm,r}(R_0) = 0 \quad (\text{für alle } l, m \text{ außer } l = 2, m = 1)$$

(analog für g_{lm} , h_{lm} , k_{lm}). (Für die Funktionen mit $l = 2$, $m = 1$ haben wir dagegen an der Stelle R_0 die Randbedingungen (B, III, 5) bis (B, III, 9).)

Die allgemeine Lösung der Differentialgleichung (B,III,10) lautet:

$$f_{lm}(r) = A \cdot r^{\ell} + B \cdot r^{\ell-1} \quad (\text{analog } g_{lm}, h_{lm}, k_{lm}) .$$

Aus der Regularitätsbedingung (B,III,11) folgt für alle l, m sofort $B = 0$; aus der Bedingung (B,III,12) folgt dann $A = 0$ für alle Entwicklungsfunktionen mit $l \neq 2$, $m \neq 1$.

Für $l = 2$, $m = 1$ haben wir zunächst:

$$f_{2,1}(r) = A_f \cdot r^2, \quad g_{2,1}(r) = A_g \cdot r^2,$$

$$h_{2,1}(r) = A_h \cdot r^2, \quad k_{2,1}(r) = A_k \cdot r^2.$$

Aus den Randbedingungen (B,III,5) bis (B,III,9) ergibt sich:

$$A_f = 0, \quad A_g \neq 0, \quad A_h = -A_g \neq 0, \quad A_k = 0.$$

Die allgemeine Lösung des Extremalprinzips (B,II,2) unter Beachtung der Nebenbedingungen (B,II,3) hat somit bei Zugrundelegung des Modells einer konstanten Einteilchendichte die Form (vgl. (B,III,2), (B,III,7)) :

$$S_1 = A' \cdot r^2 \operatorname{Im} Y_{2,1}(\vartheta, \varphi)$$

$$S_2 = -A' \cdot r^2 \operatorname{Re} Y_{2,1}(\vartheta, \varphi)$$

Aus der Literatur [21] entnimmt man $Y_{2,1}(\vartheta, \varphi) = -\frac{1}{2\sqrt{8\pi}} \cdot \sin 2\vartheta \cdot e^{i\varphi}$, so daß wir die allgemeine Lösung auch in der Form schreiben können:

$$\begin{aligned} S_1 &= A \cdot r^2 \sin \mathcal{V} \cos \mathcal{V} \sin \varphi = A \cdot yz \\ (B, III, 13) \quad S_2 &= -A \cdot r^2 \sin \mathcal{V} \cos \mathcal{V} \cos \varphi = -A \cdot xz . \end{aligned}$$

Damit erhalten wir als die im Sinne des Extremalprinzips der spezifischen Entkopplung "besten" Bestimmungsfunktionen der körperfesten ζ - Achse beim Einteilchenansatz:

$$S_1 = A \cdot \sum_i y_i z_i , \quad S_2 = -A \cdot \sum_i x_i z_i$$

(A ergibt sich aus der Wahl der Konstanten auf der rechten Seite der Nebenbedingungen (B, II, 4)).

Die körpergebundene ζ - Achse ist also so zu definieren, daß

$$\sum_i y_i z_i = 0 , \quad \sum_i x_i z_i = 0$$

gilt. ζ ist mithin Hauptträgheitsachse.

Für den Einteilchenansatz gilt somit: Zu jeder Punktkonfiguration gehört als Achse der spezifischen Entkopplung die der Konfiguration entsprechende Hauptträgheitsachse.

Unsere Voraussetzung der Axialsymmetrie (vgl. Fußnote auf S. 14) bedeutet in diesem speziellen Fall, daß alle in dem System nach Maßgabe der Wellenfunktion auftretenden Punktkonfigurationen von einer gemeinsamen Achse aus betrachtet eine axialsymmetrische Dichte liefern.

Die Berechnung des zu der obigen Definition der ζ - Achse gehörenden effektiven Trägheitsmoments und die eingehende Diskussion der oben gefundenen Lösung des Extremalprinzips

wird im Anschluß an den folgenden Abschnitt geschehen, in welchem wir eine Erweiterung des obigen Resultats, welches für den speziellen Ansatz einer konstanten intrinsisch deformierten Einteilchendichte hergeleitet worden ist, auf eine viel allgemeinere Klasse von Einteilchendichten durchführen werden.

Zum Abschluß dieses Abschnitts bemerken wir noch, daß, wie unsere Herleitung zeigt, die Form $s_1 \sim \text{Im } Y_{2,1}(\mathcal{V}, \varphi)$ der Lösung eine Folge der Nebenbedingung $\langle L_x S_1 \rangle = C \neq 0$ ist, da aufgrund der von uns vorausgesetzten Deformation $\sim \beta Y_{2,0}$ im Integral $\langle L_x S_1 \rangle$ nur diese Entwicklungsglieder von s_1 zur Wirkung kommen.

In Teil A. III. 3. stellten wir fest, daß $\langle L_x S_1 \rangle$ und $\langle L_y S_2 \rangle$ ein Maß dafür sind, wie stark die ζ -Achse nachgeführt werden muß, wenn man ein Teilchen einer gegebenen Konfiguration infinitesimal verrückt. Für unsere Problemstellung sind daher nur Funktionen S_1 sinnvoll, welche in der Lage sind, die ζ -Achse tatsächlich nachzuführen.

Zusammen mit dem oben Gesagten ist es dann auch von diesem Standpunkt aus verständlich, daß die Lösung s_1 nur eine Winkelabhängigkeit der Form $\text{Im } Y_{2,1}(\mathcal{V}, \varphi)$ besitzt, da alle anderen Winkelabhängigkeiten in der Entwicklung (B,III,2) von s_1 keinen Beitrag zu $\langle L_x S_1 \rangle$ liefern und somit nicht geeignet sind, die Nachführung der ζ -Achse zu bewerkstelligen. (Eine analoge Überlegung gilt für s_2 .)

Unter diesem Gesichtspunkt hätte man auch so vorgehen können, daß man zur Minimierung von $\langle \Theta^{-1} \rangle$ nur solche Ansätze für s_1, s_2 zugelassen hätte, welche einen Beitrag zu $\langle L_x s_1 \rangle$, $\langle L_y s_2 \rangle$ liefern und damit die ζ -Achse nachführen können. Man hätte auch dann die Lösungen (B,III,13) für s_1, s_2 erhalten.

2. Erweitertes Modell für die deformierte Einteilchendichte

In Anhang D.II wird gezeigt, daß sich für alle Einteilchendichten der Form

$$(B, III, 14) \quad \sigma_1(r, \vartheta) = F \left(\frac{r \sqrt{1 - \frac{2}{\mu+1} \cos^2 \vartheta}}{\sqrt{\frac{\mu-1}{\mu+1}}} \right)$$

als strenge Lösung des Extremalprinzips $s_1 = A \cdot yz$, $s_2 = -A \cdot xz$ ergibt. Dabei bedeutet in (B, III, 14) F eine beliebige, physikalisch sinnvolle reelle Funktion, der Parameter μ in (B, III, 14) ist durch das Verhältnis

$$(B, III, 15) \quad \mu = \frac{\int \sigma_1 \cdot (y^2 + z^2) d\tau}{\int \sigma_1 \cdot (z^2 - y^2) d\tau}$$

gegeben (die rechte Seite hängt über (B, III, 14) ebenfalls von μ ab).

Für $\frac{1}{\mu}$ können wir auch schreiben:

$$(B, III, 16) \quad \frac{1}{\mu} = \frac{\int \sigma_1 \cdot (z^2 - y^2) d\tau}{\int \sigma_1 \cdot (y^2 + z^2) d\tau} = 1 - 2 \frac{\int \sigma_1 y^2 d\tau}{\int \sigma_1 (z^2 + y^2) d\tau},$$

und da $0 < \frac{\int \sigma_1 y^2 d\tau}{\int \sigma_1 (z^2 + y^2) d\tau} < 1$ gilt, folgt aus (B, III, 16) :

$|\frac{1}{\mu}| < 1$. Für das Verhältnis (B, III, 15) hat man also stets $|\mu| > 1$.

Die Flächen konstanter Dichte für $\sigma_1(r, \mathcal{V})$ von (B,III,14) sind durch

$$(B,III,17) \quad r = \frac{r_0 \sqrt{\frac{\mu-1}{\mu+1}}}{\sqrt{1 - \frac{2}{\mu+1} \cos^2 \mathcal{V}}} \quad (r_0 > 0 \text{ beliebig})$$

gegeben. Dies läßt sich umformen zu:

$$(B,III,18) \quad \frac{x^2}{r_0^2 \left(\frac{\mu-1}{\mu+1}\right)} + \frac{y^2}{r_0^2 \left(\frac{\mu-1}{\mu+1}\right)} + \frac{z^2}{r_0^2} = 1.$$

Wegen $|\mu| > 1$ sind die Flächen konstanter Dichte für $\sigma_1(r, \mathcal{V})$ von (B,III,14) somit Rotationsellipsoide mit den Halbachsen:

$$a = b = r_0 \sqrt{\frac{\mu-1}{\mu+1}}, \quad c = r_0.$$

Für $\mu > 1$ ist $a < c$ (Ellipsoid prolat), für $\mu < 1$ ist $a > c$ (Ellipsoid oblat), im Falle $|\mu| = \infty$ schließlich ist $a = b = c = r_0$, und die Flächen konstanter Dichte sind Kugeloberflächen. (Den Zusammenhang des Vorzeichens von μ mit der Deformation von σ_1 ersieht man auch unmittelbar aus (B,III,15); insbesondere folgt aus (B,III,15) für rundes σ_1 auch $\mu = \pm \infty$).

Das Rotationsellipsoid $r(\mathcal{V}) = \frac{a}{\sqrt{1 - f \cdot \cos^2 \mathcal{V}}}$
 $(a = r_0 \cdot \sqrt{\frac{\mu-1}{\mu+1}}, \quad f = \frac{2}{\mu+1} \sim \text{numerische Exzentrizität, vgl. (B,III,17)})$ und das Sphäroid $r(\mathcal{V}) = R_0 (1 + \beta Y_{2,0}(\mathcal{V}))$ stimmen in den Ordnungen β^0, β^1 bzw. f^0, f^1 überein, wenn

$$R_0 = a \cdot \left(1 + \frac{1}{6}f\right),$$

$$\beta = \frac{1}{3} f \cdot \sqrt{\frac{4\pi}{5}}.$$

Da sich für unsere Betrachtungen nur diese Ordnungen als wichtig erweisen werden, können wir im weiteren sphäroidale und ellipsoidale Deformation miteinander identifizieren.

Das Resultat (B,III,14) läßt sich dann wie folgt formulieren:

Für alle deformierten Dichten $\sigma_1^{\text{def}}(r, \mathcal{V})$, die aus beliebigen runden Dichten $\sigma_1^{(0)}(r)$ durch die Ersetzung

$$r \longrightarrow \frac{r}{1 + \beta \gamma_{20}(\mathcal{V})}$$

hervorgehen,

$$(B,III,19) \quad \sigma_1^{\text{def}}(r, \mathcal{V}) = \sigma_1^{(0)}\left(\frac{r}{1 + \beta \gamma_{20}(\mathcal{V})}\right)$$

(Sphäroide als Flächen konstanter Dichte) ,

ergibt sich im Rahmen der uns interessierenden Ordnungen des Deformationsparameters als Lösung des Extremalprinzips:

$$s_1 = A \cdot yz \quad , \quad s_2 = - A \cdot xz \quad . \quad *)$$

Die Wahl der körpergebundenen ζ - Achse als Hauptträgheitsachse erweist sich also im Rahmen des Einteilchenansatzes auch für alle deformierten Einteilchendichten vom Typ (B,III,19) als die (im Sinne des Extremalprinzips der spezifischen Entkopplung) "beste" Definition einer körpergebundenen ζ - Achse.

*)

Die zuerst verwendete sphäroidal deformierte konstante Einteilchendichte fügt sich zwanglos in diese Klasse von Einteilchendichten ein.

3. Berechnung des effektiven Trägheitsmoments

Wir legen eine deformierte Einteilchendichte vom Typ (B,III,19) und die Definition von ζ als Hauptträgheitsachse ($s_1 = A \cdot yz$, $s_2 = -A \cdot xz$) zugrunde und fragen nach dem zugehörigen effektiven Trägheitsmoment.

Nach (B,II,5) ist das effektive Trägheitsmoment gegeben durch

$$\frac{1}{\Theta_{\text{eff}}} = \frac{\frac{1}{2m} \int \sigma_1^{\text{def}}(\tau, \mathcal{V}) [(\nabla s_1)^2 + (\nabla s_2)^2] d\tau}{\left(\int \sigma_1^{\text{def}}(\tau, \mathcal{V}) l_x s_1 d\tau \right)^2}.$$

Setzen wir die obigen Ausdrücke für s_1 und s_2 ein, so erhalten wir:

$$(B, III, 20) \quad \frac{1}{\Theta_{\text{eff}}} = \frac{\frac{1}{2m} \int \sigma_1^{\text{def}}(\tau, \mathcal{V}) [(y^2 + z^2) + (x^2 + z^2)] d\tau}{\left(\int \sigma_1^{\text{def}}(\tau, \mathcal{V}) \cdot (y^2 - z^2) d\tau \right)^2}.$$

Für das Nennerintegral können wir unter Ausnützung der Axialsymmetrie von σ_1^{def} bezüglich der ζ - (hier z -) Achse schreiben:

$$\begin{aligned} \int \sigma_1^{\text{def}}(\tau, \mathcal{V}) (y^2 - z^2) d\tau &= \int \sigma_1^{\text{def}} r^2 (\sin^2 \mathcal{V} \sin^2 \varphi - \cos^2 \mathcal{V}) r^2 d\tau d\Omega \\ &= \frac{1}{2} \int \sigma_1^{\text{def}} r^2 (\sin^2 \mathcal{V} - 2 \cos^2 \mathcal{V}) r^2 d\tau d\Omega \\ &= -\sqrt{\frac{4\pi}{5}} \cdot \int \sigma_1^{\text{def}} r^2 Y_{2,0}(\mathcal{V}) d\tau, \end{aligned}$$

es ist also bis auf einen Zahlenfaktor identisch mit dem Quadrupolmoment des durch σ_1^{def} beschriebenen Teilchensystems.

Für das Quadrupolmoment eines deformierten Teilchensystems setzt man im allgemeinen an, daß es gleich ist dem Quadrupolmoment eines Sphäroids mit der Oberfläche $r(\vartheta) = R_0(1+\beta Y_{2,0}(\vartheta))$ und konstanter Dichte $\rho_0 = \frac{N}{V}$. Da die deformierte Dichte σ_1^{def} im Rahmen dieses Ansatzes das Quadrupolmoment wiedergeben soll, können wir daher für das Nennerintegral setzen:

$$\int \sigma_1^{\text{def}}(\tau, \vartheta) \cdot (y^2 - z^2) d\tau = \int_{\text{"Sphäroid"}} \rho_0 (y^2 - z^2) d\tau,$$

wobei auf der rechten Seite über das Sphäroid $r(\vartheta) = R_0(1+\beta Y_{2,0}(\vartheta))$ integriert wird, und erhalten nach Ausführung dieser Integration:

$$(B, III, 21) \quad \int \sigma_1^{\text{def}}(\tau, \vartheta) \cdot (y^2 - z^2) d\tau = - \rho_0 R_0^5 \beta \sqrt{\frac{4\pi}{5}} + \sigma(\beta^2).$$

Für das Integral im Zähler können wir schreiben, indem wir wiederum auf sphärische Polarkoordinaten übergehen:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \int \sigma_1^{\text{def}}(\tau, \vartheta) [x^2 + y^2 + z^2] d\tau \\ (B, III, 22) \quad &= \frac{1}{4} \int \sigma_1^{\text{def}} r^2 [\sin^2 \vartheta + 2 \cos^2 \vartheta] d\tau = \frac{1}{3} \int \sigma_1^{\text{def}} r^2 \left(1 + \frac{1}{2} \frac{4\pi}{5} Y_{2,0}\right) d\tau \\ &= \frac{1}{3} \int \sigma_1^{(0)}(\tau) r^2 d\tau + \sigma(\beta), \end{aligned}$$

wobei $\sigma_1^{(0)}$ die runde Dichte bedeutet, aus der σ_1^{def} durch Deformation hervorgegangen ist (vgl. (B, III, 19)). Das Zählerintegral ist also bis auf Ordnungen β^1 und höhere und abgesehen von einem Zahlenfaktor identisch mit dem mittleren quadratischen Radius des durch die runde Dichte $\sigma_1^{(0)}$ beschriebenen Systems. Dieser wird üblicherweise dem mittleren quadratischen Radius der (volumengleichen) Kugel vom Radius R_0

mit der konstanten Dichte ρ_0 gleichgesetzt:

$$(B, III, 23) \quad \int_0^{r_0} \tau^2 d\tau = \int_0^{r_0} \rho_0 \tau^2 d\tau = \frac{4\pi}{5} \rho_0 R_0^5 .$$

"Kugel vom
Radius R_0 "

Setzt man dies, (B, III, 21) und (B, III, 22) in (B, III, 20) ein,
so erhält man schließlich für Θ_{eff} :

$$\begin{aligned} \Theta_{\text{eff}} &= \frac{2}{5} M R_0^2 \cdot \beta^2 \cdot \frac{5}{4\pi} \cdot \frac{9}{4} + \sigma(\beta^3) \\ &= \Theta_{\text{starr}} \cdot \frac{9}{4} \cdot \frac{5}{4\pi} \cdot \beta^2 + \sigma(\beta^3) , \end{aligned}$$

wobei wir $M = N \cdot m$ und $\Theta_{\text{starr}} = \frac{2}{5} M R_0^2$ gesetzt haben.

4. Diskussion der Ergebnisse

Die im vorhergehenden Abschnitt hergeleiteten Ausdrücke (B,III,20) und (B,III,24) für Θ_{eff} erweisen sich als identisch mit dem Trägheitsmoment, das man im Rahmen des hydrodynamischen Kernmodells erhält (vgl. z.B. [22, 23]).- Die Theorie der spezifischen Entkopplung stellt somit im Rahmen der Näherung des Einteilchenansatzes einen engen Zusammenhang her zwischen der Wahl von Hauptträgheitsachsen als körpergebundenes Koordinatensystem und dem hydrodynamischen Trägheitsmoment.

Alle Ergebnisse des Einteilchenansatzes sind nur sinnvoll für Systeme wechselwirkungsfreier Bosonen. Vergleicht man dennoch das hier gefundene Trägheitsmoment mit dem empirischen Trägheitsmoment bei deformierten Atomkernen im Bereich der Lanthaniden und Aktiniden, so stellt man fest, daß das hydrodynamische Trägheitsmoment um einen Faktor 3 - 4 gegenüber den experimentellen Werten zu klein ist. Dies wiederum ist ein Hinweis darauf, daß der Einteilchenansatz bei Kernen zur Bestimmung des richtigen körpergebundenen Koordinatensystems nicht hinreicht. -

Wir gehen nun von Systemen unabhängiger Bosonen ab und legen im weiteren bei der Durchführung des Zweiteilchenansatzes Systeme wechselwirkender Fermionen, speziell: deformierte Atomkerne, zugrunde.

Teil C

Lösung des Extremalprinzips der spezifischen Entkopplung für den Zweiteilchenansatz

I. Zweiteilchenansatz

Wir betrachten in diesem Teil den Zweiteilchenansatz für die Bestimmungsfunktionen S_1, S_2 der körpergebundenen ζ -Achse. S_1, S_2 haben also die Gestalt

$$(C,I,1) \quad S_1 = \sum_{i < j} t_1(\underline{r}_i, \underline{r}_j) \quad , \quad S_2 = \sum_{i < j} t_2(\underline{r}_i, \underline{r}_j)$$

mit

$$(C,I,2) \quad t_1(\underline{r}_i, \underline{r}_j) = t_1(\underline{r}_j, \underline{r}_i) \quad , \quad t_2(\underline{r}_i, \underline{r}_j) = t_2(\underline{r}_j, \underline{r}_i) .$$

$\underline{r}_i$ und $\underline{r}_j$ sind dabei, wie in Teil B, die auf das gesuchte körpergebundene System bezogenen Koordinaten von Teilchen i und j . Die Permutationsinvarianz von S_1, S_2 ist in dem obigen Ansatz wiederum bereits dadurch berücksichtigt, daß für alle Teilchenpaare i, j einheitliche Funktionen t_1, t_2 auftreten; da wir in $(C,I,1)$ über $i < j$ summieren, müssen außerdem die Funktionen t_1, t_2 bezüglich der Vertauschung von $\underline{r}_i, \underline{r}_j$ symmetrisch sein (vgl. $(C,I,2)$).

Der Ansatz $(C,I,1)$ schließt insbesondere Einteilchenansätze ein, denn für $t(\underline{r}_i, \underline{r}_j) = s(\underline{r}_i) + s(\underline{r}_j)$ errechnet man:

$$(C,I,3) \quad S = \sum_{i < j} (s(\underline{r}_i) + s(\underline{r}_j)) = (N-1) \sum_i s(\underline{r}_i) .$$

Der Ansatz $(C, I, 1)$ bedeutet somit eine Entwicklung der Bestimmungsfunktionen S_1 und S_2 bis einschließlich zu Zweiteilchentermen. Wie bereits bemerkt, ist mindestens solch ein Ansatz für die Fermionensysteme, die wir im folgenden stets zugrundegelegt denken, erforderlich. Inwieweit jedoch die korrekte Beschreibung der kollektiven Rotationen solcher Teilchensysteme eine Entwicklung von S_1 und S_2 über Zweiteilchenterme hinaus notwendig macht, kann erst an späterer Stelle erörtert werden.

Gesucht sind die in den Entwicklungen $(C, I, 1)$ von S_1 und S_2 auftretenden Zweiteilchenfunktionen $t_1(\underline{r}, \underline{r}')$, $t_2(\underline{r}, \underline{r}')$. Zu ihrer Bestimmung mit Hilfe des Extremalprinzips der spezifischen Entkopplung ermitteln wir im folgenden Abschnitt, in welcher mathematischen Form die im Extremalprinzip auftretenden Ausdrücke von t_1 , t_2 abhängen.

II. Mathematische Form des Extremalprinzips für den

Zweiteilchenansatz

Wir gehen aus vom Extremalprinzip der spezifischen Entkoppelung in seiner allgemeinen Formulierung (vgl. (A,III,11) - (A,III,14)) und berechnen zunächst das Funktional $\langle \Theta^{-1} \rangle$ in Abhängigkeit von t_1, t_2 .

Nach (A,III,11) ist:

$$\langle \Theta^{-1} \rangle = \frac{1}{2m} \langle \phi_0 | \sum_{i=1}^N [(\nabla_{\mathbf{r}_i} S_1)^2 + (\nabla_{\mathbf{r}_i} S_2)^2] | \phi_0 \rangle.$$

Aus $S_1 = \sum_{i < j} t_1(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ folgt zusammen mit der Permutationssymmetrie von t_1 :

$$\nabla_{\mathbf{r}_i} S_1 = \sum_{j \neq i} \nabla_{\mathbf{r}_i} t_1(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j);$$

daher wird:

$$\begin{aligned} \langle \Theta^{-1} \rangle = \frac{1}{2m} \left\{ \langle \phi_0 | \sum_{i \neq j} [(\nabla_{\mathbf{r}_i} t_1(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j))^2 + (\nabla_{\mathbf{r}_i} t_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j))^2] | \phi_0 \rangle \right. \\ \left. + \langle \phi_0 | \sum_{\substack{i \neq j, i \neq k \\ j \neq k}} [\nabla_{\mathbf{r}_i} t_1(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \cdot \nabla_{\mathbf{r}_i} t_1(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k) + \right. \\ \left. + \nabla_{\mathbf{r}_i} t_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \cdot \nabla_{\mathbf{r}_i} t_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k)] | \phi_0 \rangle \right\}. \end{aligned}$$

Die in den Brackets stehenden Ausdrücke sind lokale Zwei- bzw. Dreiteilchenoperatoren. Die Erwartungswerte können nach (A,IV,5) und (A,IV,6) zurückgeführt werden auf Integrale über die intrinsische Zwei- bzw. Dreiteilchendichte, so daß wir für $\langle \Theta^{-1} \rangle$ erhalten:

$$\langle \Theta^{-1} \rangle = \frac{1}{2m} \left\{ \int \bar{\sigma}_2(\underline{r}, \underline{r}') [(\nabla_{\underline{r}} t_1(\underline{r}, \underline{r}'))^2 + (\nabla_{\underline{r}} t_2(\underline{r}, \underline{r}'))^2] d\underline{r} d\underline{r}' + \right.$$

$$(C, II, 1) \quad + \int \bar{\sigma}_3(\underline{r}, \underline{r}', \underline{r}'') [\nabla_{\underline{r}} t_1(\underline{r}, \underline{r}') \cdot \nabla_{\underline{r}} t_1(\underline{r}, \underline{r}'') + \\ + \nabla_{\underline{r}} t_2(\underline{r}, \underline{r}') \cdot \nabla_{\underline{r}} t_2(\underline{r}, \underline{r}'')] d\underline{r} d\underline{r}' d\underline{r}''.$$

Für die Nebenbedingungen $\langle L_x S_1 \rangle = 1$ usw. ergibt sich

$$\text{aus} \quad l_x(i) S_1 = \sum_{j \neq i} l_x(i) t_1(\underline{r}_i, \underline{r}_j) \text{ zunächst:}$$

$$L_x S_1 = \sum_{i \neq j} l_x(i) t_1(\underline{r}_i, \underline{r}_j),$$

und daraus:

$$\langle \phi_0 | L_x S_1 | \phi_0 \rangle = \int \bar{\sigma}_2(\underline{r}, \underline{r}') l_x(\underline{r}) t_1(\underline{r}, \underline{r}') d\underline{r} d\underline{r}' \stackrel{!}{=} 1$$

(analog die anderen Nebenbedingungen).

Beim Zweiteilchenansatz für S_1, S_2 benötigt man somit zur Berechnung von $\langle \Theta^{-1} \rangle$ die intrinsische Zwei- und Dreiteilchendichte, zur Auswertung der Nebenbedingungen jedoch nur die Zweiteilchendichte.*)

Das Extremalprinzip der spezifischen Entkopplung führt also beim Zweiteilchenansatz auf das folgende mathematische Problem:

*)

Man überlegt sich leicht, daß allgemein beim k-Teilchenansatz für S_1, S_2 zur Berechnung von $\langle \Theta^{-1} \rangle$ die Dichten bis hin zur intrinsischen $(2k-1)$ -Teilchendichte bekannt sein müssen, zur Berechnung von $\langle L_x S_1 \rangle$ usw. jedoch nur die k-Teilchendichte nötig ist.

Man minimiere das Funktional $\langle \Theta^{-1} \rangle$ von (C,II,1),

$$(C,II,2) \quad \langle \Theta^{-1} \rangle \stackrel{!}{=} \min.,$$

unter den Nebenbedingungen:

$$(C,II,3) \quad \begin{aligned} \int \sigma_2 \, l_x t_1(\underline{r}, \underline{r}') d\tau d\tau' &= 1 & \int \sigma_2 \, l_y t_1(\underline{r}, \underline{r}') d\tau d\tau' &= 0 \\ \int \sigma_2 \, l_x t_2(\underline{r}, \underline{r}') d\tau d\tau' &= 0 & \int \sigma_2 \, l_y t_2(\underline{r}, \underline{r}') d\tau d\tau' &= 1 \end{aligned}$$

bei fest vorgegebener intrinsischer Zwei- und Dreiteilchendichte $\sigma_2(\underline{r}, \underline{r}')$, $\sigma_3(\underline{r}, \underline{r}', \underline{r}'')$.

Statt der 1 darf in den Nebenbedingungen (C,II,3) wiederum eine beliebige, aber feste Konstante $C \neq 0$ stehen (vgl. (A,III,7)). Das effektive Trägheitsmoment ergibt sich in diesem Fall zu

$$(C,II,4) \quad \frac{1}{\Theta_{\text{eff}}} = \frac{\langle \Theta^{-1} \rangle}{\langle L_x S_1 \rangle^2} = \frac{\langle \Theta^{-1} \rangle}{C^2}$$

($\langle \Theta^{-1} \rangle$ wie in (C,II,1)), wobei man in $\langle \Theta^{-1} \rangle$ die das modifizierte Extremalprinzip (mit $C \neq 0$ beliebig) lösenden Funktionen t_1 , t_2 einzusetzen hat.)

III. Allgemeine Überlegungen zu Modellen der intrinsischen Zwei- und Dreiteilchendichte

1. Begründung der Notwendigkeit von Modellen

Um das in II. formulierte mathematische Problem lösen zu können, benötigen wir wieder Modelle für die in den Integralen auftretende intrinsische Zwei- und Dreiteilchendichte.

Die Situation ist hier insofern schwieriger als bei der Einteilchendichte, als höhere Dichten dem Experiment nicht so unmittelbar zugänglich sind wie die Einteilchendichte, so daß man darauf angewiesen ist, Mehrteilchendichten entsprechend den physikalischen Vorstellungen über das betrachtete Teilchensystem und die darin vorliegenden Korrelationen modellmäßig zu erfassen.

Es ist klar, daß die sich aus der Lösung des Extremalprinzips ergebenden Bestimmungsfunktionen S_1 , S_2 sowie die damit verbundene Definition des körpergebundenen Systems und das zugehörige Trägheitsmoment i.a. stark von dem Modell für die benötigten Teilchendichten abhängen werden.

Wenn auch die Überlegungen des Einteilchenansatzes nur auf Bosonensysteme anwendbar sind, so stellt die dort betrachtete Klasse von deformierten Einteilchendichten im wesentlichen doch das Modell dar, welches man für eine deformierte Einteilchendichte überhaupt sinnvollerweise ansetzen kann. Das körpergebundene Koordinatensystem und das zugehörige Trägheitsmoment ergeben sich daher bei einem Einteilchenansatz in entsprechend eindeutiger Weise.

Diese Eindeutigkeit ist beim Zweiteilchenansatz nach dem obigen nicht mehr gegeben. Wir betonen daher an dieser Stelle ausdrücklich, daß wir im Unterschied zum Einteilchenansatz bei der Behandlung des Zweiteilchenansatzes vor der erweiterten Aufgabe stehen,

- a) zunächst ein mit den zugrundeliegenden physikalischen Vorstellungen über deformierte Atomkerne im Bereich der Lanthaniden und Aktiniden konsistentes Modell für σ_2 , σ_3 zu finden,
- b) und dann zu untersuchen, ob für dieses Modell der Dichten die Lösung des Extremalprinzips der spezifischen Entkoppelung im Rahmen des Zweiteilchenansatzes die experimentellen Trägheitsmomente dieser Kerne zu reproduzieren vermag.

Der Vergleich mit den experimentellen Trägheitsmomenten wird uns dabei in die Lage versetzen, Rückschlüsse auf die Struktur der in Kernen tatsächlich vorliegenden Zweiteilchenkorrelationen zu ziehen.

2. Forderungen an Modelle für intrinsische Dichten bei Atomkernen

Ein Modell für die Ein- und Mehrteilchendichten von Kernen im Bereich der Lanthaniden und Aktiniden muß die folgenden physikalischen Aspekte berücksichtigen:

- a) den Deformationsaspekt: Energiespektren in der Form von Rotationsbanden, Quadrupolmomente, elektromagnetische Übergänge zeigen an, daß Kerne in dem betrachteten Massenbereich eine stabile Deformation besitzen,
- b) den Paarungsaspekt: eine Vielzahl anderer experimenteller Daten (Energiefücken bei geraden Kernen, das Fehlen niedrig liegender Anregungen, der even-odd-Effekt und anderes, vgl. z.B.[25]) weisen darauf hin, daß in dem betrachteten Massenzahlbereich Paarungseffekte wichtig sind, (diese können als Folge der Korrelationen der Nukleonen über die kurzreichweitigen anziehenden Kernkräfte angesehen werden).

Außerdem muß in den Modellen für die Dichten die Tatsache berücksichtigt werden, daß Nukleonen Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen sind und daher dem Pauliprinzip unterliegen.

Wir werden in den folgenden Abschnitten versuchen, Modelle der intrinsischen Dichten aufzustellen, welche den genannten Aspekten Rechnung tragen, und wenden uns zunächst in IV. einem Modell für den Deformationscharakter der Dichten zu.

IV. Modell für den Deformationscharakter der Dichten

1. Aufstellung des Modells

Wir suchen in diesem Abschnitt ein Modell für die Dichten, welches den Deformationsaspekt der betrachteten Teilchensysteme berücksichtigt.

In Analogie zur Diskussion beim Einteilchenansatz (vgl. (B,III,19)) setzen wir an, daß deformierte Dichten σ_1^{def} , σ_2^{def} usw. aus "runden" Dichten $\sigma_1^{(o)}(r)$, $\sigma_2^{(o)}(r_1, r_2, \cos \mathcal{J}_{12})$ usw. durch die Ersetzung $r \rightarrow \frac{r}{1 + \beta Y_{2,0}}$ hervorgehen:

$$\sigma_1^{\text{def}}(r_1) = \sigma_1^{(o)}\left(\frac{r_1}{1 + \beta Y_{2,0}(\mathcal{J}_1)}\right)$$

$$(C, IV, 1) \quad \sigma_2^{\text{def}}(r_1, r_2) = \sigma_2^{(o)}\left(\frac{r_1}{1 + \beta Y_{2,0}(\mathcal{J}_1)}, \frac{r_2}{1 + \beta Y_{2,0}(\mathcal{J}_2)}, \cos \mathcal{J}_{12}\right)$$

usw.

Durch den Ansatz (C,IV,1) ist die Art und Weise der Abhängigkeit der Dichten von der Deformation festgelegt. Es verbleibt noch, ein Modell für die runden Dichten $\sigma_2^{(o)}$ usw. aufzustellen. Dies wird in C.V. erfolgen. - Wie im folgenden Abschnitt gezeigt wird, erlaubt es der Ansatz (C,IV,1) jedoch bereits, Aussagen zu gewinnen über die Struktur, insbesondere die Winkelabhängigkeit, von Zweiteilchenfunktionen t_1 , t_2 , welche die Nebenbedingungen (C,II,3) erfüllen, ohne weitere Annahmen über $\sigma_2^{(o)}$ zu machen.

*)

D.h. die entsprechende Dichte hat bezüglich der in ihr auftretenden Koordinaten den Gesamtdrehimpuls 0.

2. Auswertung der Nebenbedingungen für das Modell einer deformierten Zweiteilchendichte

Wir entwickeln die Winkelabhängigkeit der reellen Zweiteilchenfunktionen $t_1(\underline{r}, \underline{r}')$, $t_2(\underline{r}, \underline{r}')$ nach dem bezüglich Ω ($= \mathcal{V}$, φ), Ω' ($= \mathcal{V}'$, φ') vollständigen System von reellen Funktionen $\text{Re} [Y_\ell(\Omega) \times Y_{\ell'}(\Omega')]_M^L$, $\text{Im} [Y_\ell(\Omega) \times Y_{\ell'}(\Omega')]_M^L$.*)

Die allgemeine Entwicklung von $t_1(\underline{r}, \underline{r}')$ hat dann die Form:

$$(C, IV, 2) \quad t_1(\underline{r}, \underline{r}') = \sum_{\ell, \ell', L, M \geq 0} \left\{ f_{\ell \ell' LM}(\underline{r}, \underline{r}') \text{Re} [Y_\ell(\Omega) \times Y_{\ell'}(\Omega')]_M^L + g_{\ell \ell' LM}(\underline{r}, \underline{r}') \text{Im} [Y_\ell(\Omega) \times Y_{\ell'}(\Omega')]_M^L \right\}$$

mit reellen Entwicklungsfunktionen $f_{\ell \ell' LM}(\underline{r}, \underline{r}')$, $g_{\ell \ell' LM}(\underline{r}, \underline{r}')$.

(Die zu fordernde Symmetrie von t_1 bezüglich Vertauschung von $\underline{r}$, $\underline{r}'$ hat noch gewisse Beziehungen zwischen diesen Funktionen zur Folge, die wir jedoch an dieser Stelle nicht benötigen).

Wir legen eine deformierte Zweiteilchendichte vom Typ (C, IV, 1) zugrunde und fragen nach $\int \sigma_2^{\text{def}} \ell_x t_1 d\tau d\tau'$. Zu diesem Zweck entwickeln wir zunächst σ_2^{def} nach Potenzen des Deformationsparameters,

$$\sigma_2^{\text{def}}(\underline{r}, \underline{r}') = \sigma_2^{(0)}(\underline{r}, \underline{r}') - \beta \left(Y_{2,0}(\Omega) \tau \frac{\partial}{\partial \underline{r}} + Y_{2,0}(\Omega') \tau' \frac{\partial}{\partial \underline{r}'} \right) \sigma_2^{(0)}(\underline{r}, \underline{r}') + o(\beta^2),$$

oder, wenn wir die Winkelabhängigkeiten wie oben entwickeln:

*) $[Y_\ell(\Omega) \times Y_{\ell'}(\Omega')]_M^L$ bedeutet die Drehimpulskopplung der Kugelfunktionen $Y_{\ell, m}(\Omega)$, $Y_{\ell', m}(\Omega')$ zu Gesamtdrehimpuls L , z-Komponente M .

$$\begin{aligned}
 \epsilon_2^{\text{def}}(\tau, \tau') &= \underbrace{\sum_{\ell} C_{\ell}(\tau, \tau') [Y_{\ell}(\Omega) \times Y_{\ell}(\Omega')]_0^0}_{\epsilon_2^{(0)}(\tau, \tau')} + \\
 (C, IV, 3) \quad &+ \underbrace{\beta \cdot \sum_{\ell, \ell'} D_{\ell \ell'}(\tau, \tau') [Y_{\ell}(\Omega) \times Y_{\ell'}(\Omega')]_0^2}_{=: \epsilon_2^{(1)}(\tau, \tau')} + \\
 &+ o(\beta^2),
 \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}
 D_{\ell \ell'}(\tau, \tau') &= (-1)^{\ell'+1} \sqrt{\frac{2\ell'+1}{4\pi}} \begin{pmatrix} \ell & \ell' & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tau \frac{\partial}{\partial \tau} C_{\ell'}(\tau, \tau') + \\
 (C, IV, 4) \quad &+ (-1)^{\ell'+1} \sqrt{\frac{2\ell'+1}{4\pi}} \begin{pmatrix} \ell & \ell' & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tau' \frac{\partial}{\partial \tau'} C_{\ell}(\tau, \tau') \\
 & \left(\begin{pmatrix} \ell & \ell' & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} : 3j\text{-Symbol} \right).
 \end{aligned}$$

Wir betrachten nun aus der Entwicklung von t_1 speziell das Entwicklungsglied

$$\begin{aligned}
 t_{\ell \ell' LM}(\tau, \tau') &= f_{\ell \ell' LM}(\tau, \tau') \operatorname{Re} [Y_{\ell}(\Omega) \times Y_{\ell'}(\Omega')]_M^L + \\
 &+ g_{\ell \ell' LM}(\tau, \tau') \operatorname{Im} [Y_{\ell}(\Omega) \times Y_{\ell'}(\Omega')]_M^L + \tau, \tau' \text{ vertauscht.}
 \end{aligned}$$

Dann ist

$$\begin{aligned}
 \int \epsilon_2^{\text{def}} \ell_x(\tau) t_{\ell \ell' LM} d\tau d\tau' &= \\
 \int (\epsilon_2^{(0)} + \beta \epsilon_2^{(1)} + o(\beta^2)) \cdot \underbrace{(\ell_x(\tau) + \ell_x(\tau'))}_{L_x} \cdot \\
 \cdot (f_{\ell \ell' LM} \operatorname{Re} [Y_{\ell}(\Omega) \times Y_{\ell'}(\Omega')]_M^L + g_{\ell \ell' LM} \operatorname{Im} [Y_{\ell}(\Omega) \times Y_{\ell'}(\Omega')]_M^L) d\tau d\tau'.
 \end{aligned}$$

Da wir L_x auch nach links wirken lassen können und $\sigma_2^{(0)}$

drehinvariant ist, erhalten wir keinen Beitrag von der Ord-

nung β^0 . Dagegen erhalten wir von $\sigma_2^{(1)}$ einen Beitrag von der Ordnung β , und zwar ist wegen $L_x [Y_\ell \times Y_{\ell'}]_0^2 = -\sqrt{6} \text{Im} [Y_\ell \times Y_{\ell'}]_1^2$ nach Ausführung der Winkelintegration:

$$(C, IV, 5) \quad \int \sigma_2^{def} L_x t_{\ell\ell'LM} d\tau d\tau' = \\ \beta \delta_{\ell,2} \delta_{\ell',1} \frac{\sqrt{6}}{2} \int D_{\ell\ell'}(\tau, \tau') g_{\ell\ell'LM}(\tau, \tau') \tau^2 \tau'^2 d\tau d\tau' + o(\beta^2) \\ (D_{\ell\ell'}, \text{ siehe } (C, IV, 4)).$$

Beiträge in der niedrigsten nicht verschwindenden Ordnung von β zu $\langle L_x S_1 \rangle$ erhält man also aus der Entwicklung (C, IV, 2) von t_1 nur von den Termen mit einer Winkelabhängigkeit der Form $\text{Im} [Y_\ell(\Omega) \times Y_{\ell'}(\Omega')]_1^2$. Da wir wieder nur an dieser Ordnung von β interessiert sind, werden wir im weiteren die Beiträge der höheren Ordnungen vernachlässigen.

Physikalisch sinnvoll sind nur solche Ansätze für t_1 , für die $\langle L_x S_1 \rangle \neq 0$ wird, die also tatsächlich in der Lage sind, die körpergebundene ζ -Achse nachzuführen. Wir werden daher für die Minimierung des Funktionals $\langle \Theta^{-1} \rangle$ nur solche Entwicklungen von t_1 betrachten, bei denen jeder Entwicklungsterm für sich einen Beitrag ungleich Null zu $\langle L_x S_1 \rangle$ liefert.

Der allgemeinste Ansatz für $t_1(\underline{r}, \underline{r}')$, welchen wir der Minimierung von $\langle \Theta^{-1} \rangle$ zugrundelegen können, hat also die Form

$$(C, IV, 6) \quad t_1(\underline{r}, \underline{r}') = \sum_{\ell\ell'} g_{\ell\ell'}(\tau, \tau') \text{Im} [Y_\ell(\Omega) \times Y_{\ell'}(\Omega')]_1^2 + \text{sym.},$$

wobei wegen des Auftretens von $D_{\ell\ell'}$ in (C, IV, 5) nur über sol-

che ℓ, ℓ' - Werte zu summieren ist, für die $D_{\ell\ell'} \neq 0$ ist (vgl. (C, IV, 4)).*)

Für den obigen Ansatz wird insbesondere $\langle L_y S_1 \rangle = o(\beta^2)$, so daß im Rahmen der von uns betrachteten Ordnungen des Deformationsparameters die Erfüllung der Nebenbedingungen

$$\langle L_x S_1 \rangle = C \neq 0, \quad \langle L_y S_1 \rangle = 0 \text{ gewährleistet ist.}$$

Die analoge Überlegung für t_2 führt dazu, daß der allgemeinste Ansatz, bei dem jeder Entwicklungsterm für sich einen Beitrag ungleich Null zu $\langle L_y S_2 \rangle$ liefert und zugleich $\langle L_x S_2 \rangle = 0$ wird (bis auf Ordnungen β^2 und höhere), bei t_2 die Form hat:

$$(C, IV, 7) \quad t_2(r, r') = \sum_{\ell, \ell'} f_{\ell\ell'}(r, r') \operatorname{Re} [Y_{\ell}(\Omega) \times Y_{\ell'}(\Omega')]^2_1 + \text{sym.},$$

mit derselben Einschränkung der ℓ, ℓ' - Summation wie bei (C, IV, 6).

Das Resultat (C, IV, 6, 7) kann als Verallgemeinerung des Ergebnisses der Auswertung der Nebenbedingungen beim Einteilchenansatz betrachtet werden, wo gezeigt wurde, daß die physikalisch sinnvollen Ansätze für die Einteilchenfunktionen s_1, s_2 die Form $s_1 = g(r) \operatorname{Im} Y_{2,1}(\Omega)$, $s_2 = F(r) \operatorname{Re} Y_{2,1}(\Omega)$ haben müssen.

Die Auswertung der Nebenbedingungen führt somit in beiden Fällen auf die Winkelabhängigkeit der zu betrachtenden Ansätze. Die Werte $L = 2, M = 1$ sind dabei dadurch begründet,

*)

Summiert wird wegen (C, IV, 4) somit über $\ell, \ell' = \ell, \ell \pm 2$ ($\ell' \geq 0$).

daß bei der Entwicklung von σ_1^{def} bzw. σ_2^{def} nach Ordnungen von β die Anteile der Dichten, welche Anlaß für Beiträge zu den Nebenbedingungen in der niedrigsten nichtverschwindenden Ordnung von β geben, sich jeweils nach $L = 2$, $M = 0$ transformieren. Anders als beim Einteilchenansatz hat man allerdings hier nicht nur eine Radialfunktion $g(r)$ bzw. $f(r)$, sondern wegen der verschiedenen Kopplungsmöglichkeiten von l, l' zu $L = 2$, $M = 1$ (vgl. (C, IV, 6, 7)) mehrere Radialfunktionen $g_{ll'}(r, r')$ bzw. $f_{ll'}(r, r')$ über das Extremalprinzip zu ermitteln. Auch bedeuten die Nebenbedingungen $\langle L_x S_1 \rangle = \langle L_y S_2 \rangle \neq 0$ hier nicht Randbedingungen, wie beim Einteilchenansatz, sondern integrale Beziehungen für die Entwicklungsfunktionen $g_{ll'}$ bzw. $f_{ll'}$ von t_1, t_2 (vgl. (C, IV, 5)). Voraussetzung für die Herleitung der Ansätze (C, IV, 6), (C, IV, 7) für t_1, t_2 war nur, daß man von einer deformierten Zweiteilchendichte des Typs (C, IV, 1) ausging. Dabei war es nicht nötig, die runde Zweiteilchendichte $\sigma_2^{(o)}$, die σ_2^{def} zugrundeliegt, näher zu spezifizieren.*)

Um jedoch mit diesen Ansätzen in das Funktional $\langle \Theta^{-1} \rangle$ eingehen und das Extremalprinzip lösen zu können, ist es notwendig, sich auf ein bestimmtes Modell für die runde Zwei-

*)

Allgemeiner erhält man diese Ansätze für jede deformierte Zweiteilchendichte, die bei Entwicklung nach Potenzen von β in den Ordnungen β^0 , β die Form (C, IV, 3) hat.

teilchendichte $\sigma_2^{(o)}$ und die ebenfalls in $\langle \Theta^{-1} \rangle$ auftretende
runde ^{*)} Dreiteilchendichte $\sigma_3^{(o)}$ festzulegen.

Dies wird im folgenden Kapitel geschehen.

*)
Die deformierte Dreiteilchendichte kann aus $\sigma_3^{(o)}$ analog zu
(C, IV, 1) gewonnen werden. Da $\langle \Theta^{-1} \rangle$ jedoch als quadratisches
Funktional i. a. bereits Beiträge in der Ordnung β^0 liefert,
und wir nur diese Ordnung betrachten werden, benötigen wir
für $\langle \Theta^{-1} \rangle$ nur $\sigma_3^{(o)}$.

V. Aufstellung eines schematischen Modells der runden Dichten

Nachdem im vorhergehenden Kapitel der Deformationsaspekt modellmäßig erfaßt worden ist, werden wir in diesem Kapitel den Paarungsaspekt sowie den Fermionencharakter der von uns betrachteten Teilchen in einem schematischen Modell für die runde Zwei- und Dreiteilchendichte berücksichtigen. Um die Grundzüge von Dichten, die sich für Paarungszustände in Atomkernen ergeben, festzustellen, betrachten wir als Beispiel zunächst die Ein-, Zwei- und Dreiteilchendichten von BCS-Paarungswellenfunktionen.

1. Vorbereitendes Beispiel: Dichten von BCS-Zuständen

Im Rahmen des Superflüssigkeitsmodells des Kernes wird analog zu dem von Bardeen, Cooper und Schrieffer [24] angegebenen Variationsverfahren zur Bestimmung des Grundzustands eines Supraleiters der Grundzustand eines Kernes als aus reinen Paarkonfigurationen aufgebaut angesetzt:

$$(c, v, 1) \quad |BCS\rangle = \prod_{k>0} (u_k + v_k a_k^+ a_{-k}^+) |0\rangle;$$

u_k, v_k sind die aus dem BCS-Modell bekannten Besetzungswahrscheinlichkeiten.



Fig. 5: Besetzungswahrscheinlichkeiten im BCS-Modell

Zu den zu $(C, V, 1)$ gehörigen Dichten gelangen wir, indem wir die entsprechenden Dichteoperatoren (sh. A. IV.) auf zweite Quantisierung umschreiben und dann den Erwartungswert mit $|BCS\rangle$ bilden.

Für die Einteilchendichte von $|BCS\rangle$ erhalten wir dabei: ^{*)}

$$\bar{G}_1^{BCS}(1) = \sum_k \varphi_k^+(1) \varphi_k(1) \cdot v_k^2.$$

Für die Zweiteilchendichte ergibt sich

$$(C, V, 2) \quad \bar{G}_2^{BCS}(1, 2) = \bar{G}_1(1) \bar{G}_1(2) - |\bar{G}(1, 2)|^2 + |\chi(1, 2)|^2$$

mit der gemischten Dichte $\bar{G}(1, 2)$:

$$(C, V, 3) \quad \bar{G}(1, 2) = \sum_k \varphi_k^+(1) \varphi_k(2) \cdot v_k^2$$

und der "anormalen" Dichte $\chi(1, 2)$:

$$(C, V, 4) \quad \chi(1, 2) = \sum_{k>0} u_k v_k (\varphi_k(1) \varphi_{-k}(2) - \varphi_{-k}(1) \varphi_k(2)).$$

Für die Dreiteilchendichte von $|BCS\rangle$ erhalten wir:

$$\begin{aligned} \bar{G}_3^{BCS}(1, 2, 3) = & \bar{G}_1(1) \bar{G}_1(2) \bar{G}_1(3) + \\ (C, V, 5) \quad & \left\{ \bar{G}_1(1) [-|\bar{G}(2, 3)|^2 + |\chi(2, 3)|^2] + \text{sym.} \right\} + \\ & \left\{ \bar{G}(1, 2) \bar{G}(2, 3) \bar{G}(3, 1) + \bar{G}(1, 2) \chi^+(2, 3) \chi(3, 1) + \text{sym.} \right\}. \end{aligned}$$

Wir betrachten nun die in der Zweiteilchendichte auftretenden Terme im einzelnen (die Terme der Dreiteilchendichte können ganz analog diskutiert werden).

*) φ_k die den Erzeugern a_k^+ entsprechende Basis von Einteilchenfunktionen.

Der erste Term ($\sigma_1(1) \cdot \sigma_1(2)$) bedeutet - als Produkt der Einteilchendichten - bis auf einen Normierungsfaktor die Zweiteilchendichte für völlig unkorrelierte Teilchen. -

Der die gemischte Dichte enthaltende Term berücksichtigt, wie aus der Literatur bekannt ist (z.B. [26]), die Korrelation der Teilchen über das Pauliprinzip (also deren Fermionencharakter), und zwar in der Weise, daß die gemischte Dichte formal dafür sorgt, daß die Zweiteilchendichte bezüglich Variation von $\underline{r}_2$ bei festem $\underline{r}_1$ an der Stelle $\underline{r}_1$ ein deutliches Minimum hat ("Fermiloch"). In Figur 6 und 7 geben wir zur Verdeutlichung das räumliche Verhalten der gemischten Dichte für den Fall an, daß die Einteilchenzustände φ_k Produkte aus Orts- und Spinwellenfunktionen sind. Dabei sind in Figur 6 ebene Wellen und in Figur 7 Oszillatorzustände als Ortswellenfunktionen gewählt.

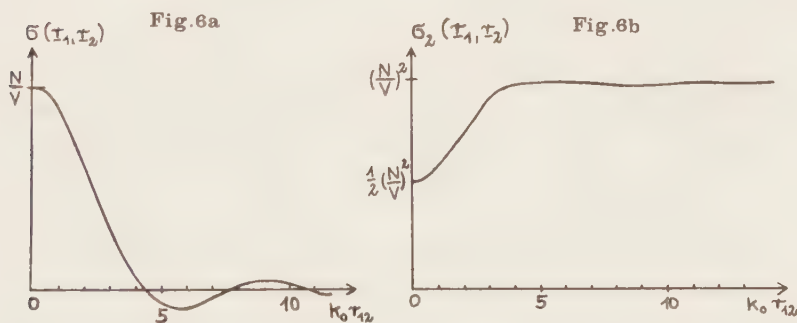


Fig. 6: Gemischte Dichte (6a) und zugehörige Zweiteilchendichte (6b) im Fall ebener Wellen (vgl. Bacher, Bethe [26]). ($k_0 = (3\pi^2 N/V)^{1/3}$ Fermiwellenzahl; vom Einfluß der Paarung ist bei der Darstellung abgesehen.)

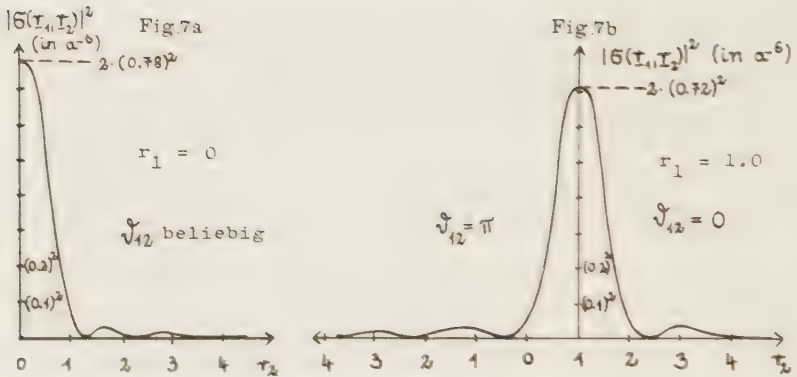


Fig. 7: Gemischte Dichte im Fall von Oszillatorzuständen (summiert wird in $(C, V, 3)$ über die Oszillatorschalen $N = 0, \dots, 4$, und $(1h), (2f)$ aus $N = 5$). Vom Einfluß der Paarung ist wie in Fig. 6 abgesehen, die Radien sind in Einheiten der Oszillatorlänge a angegeben.

Wie aus Figur 6 und 7 ersichtlich, bedeutet die gemischte Dichte eine kurzreichweitige Dichtekorrelation; der Korrelationsbereich ergibt sich von der Größenordnung V/N des "Eigenvolumens" eines Teilchens. -

Der die anomale Dichte $(C, V, 4)$ enthaltende Term der Zweiteilchendichte tritt wegen des Vorfaktors $u_k v_k$ nur auf, wenn Paarung vorliegt, und kann somit als charakteristisch für die Paarungskorrelation angesehen werden.

Geht man dabei in $(C, V, 4)$ mit Produktfunktionen aus Ort und Spin, $\varphi_k(1) = R_{nl}(r_1)Y_{\ell, m}(\Omega_1)\chi_{\frac{1}{2}, \vartheta_{12}}(1)$, ein, so ergibt sich (siehe Anhang D.III.): $|\chi(1, 2)|^2 = 2 \cdot |\chi_{\text{ort}}(r_1, r_2)|^2$ mit

$$(C, V, 6) \quad \chi_{\text{ort}}(r_1, r_2) = \sum_{nl} u_{nl} v_{nl} R_{nl}^*(r_1) R_{nl}(r_2) \frac{2\ell+1}{4\pi} P_{\ell}(\cos \vartheta_{12})$$

Wegen des Vorfaktors $u_{nl} v_{nl}$ erhält man wesentliche Beiträge zu χ_{ort} nur von wenigen Drehimpulsschalen, nämlich denjenigen,

die in einem Energiebereich $\pm \Delta$ um die Fermikante herum liegen (vgl. Fig.5). Entscheidend für die Winkelabhängigkeit der Korrelation sind daher wenige l -Werte, je nach der Größe dieser l -Werte ergibt sich über die diese Winkelabhängigkeit aufbauenden Legendrepolynome $P_l(\cos \vartheta_{12})$ eine mehr oder weniger kurzreichweitige Korrelation bezüglich des Zwischenwinkels.

Die Korrelation bezüglich der Radien r_1 und r_2 veranschaulichen wir an einem Beispiel in Figur 8. Die Schalen, die im Bereich der Paarung liegen, seien dabei etwa die 2d- und die 1h-Schale.

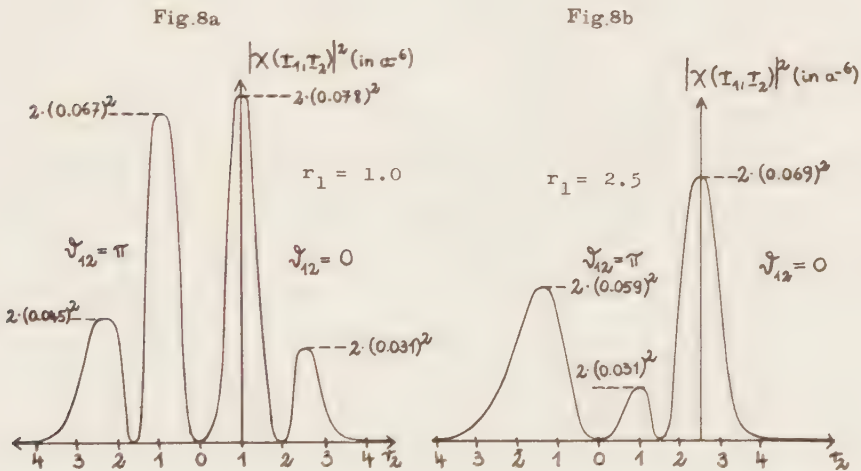


Fig. 8: Räumliches Verhalten der anomalen Dichte (vgl. (C,V,6)) (Paarwechselwirkung der 2d- und 1h-Oszillatorschale). Für die Darstellung sind als mittlere Teilchenzahlen $\bar{n}_{2d}=4$, $\bar{n}_{1h}=6$ (d.h. $u_{2d} v_{2d} = \frac{\sqrt{6}}{5}$, $u_{1h} v_{1h} = \frac{\sqrt{24}}{11}$) gewählt. Radien sind in Einheiten der Oszillatorlänge a gegeben.

Wir ersehen aus Figur 8, daß χ_{ort} bezüglich der Radien auch längerreichweitige Anteile der Korrelation enthält.

Die Winkelabhängigkeit der anomalen Dichte läßt im übrigen keinen eindeutigen Rückschluß darauf zu, ob die zugrundeliegende Zweiteilchenwechselwirkung anziehend oder abstoßend ist, weil die gefundene Winkelabhängigkeit zu einer Teilchenanhäufung sowohl unter $\mathcal{V}_{12} \approx 0$ als auch unter $\mathcal{V}_{12} \approx \pi$ führen kann (dieser letztere Fall wird in der Literatur (vgl. z.B. [25]) meist verschwiegen).

Was die Größenordnung der Amplitude von χ_{ort} an der Stelle $\underline{r}_1 = \underline{r}_2$ anbetrifft, so entnehmen wir aus dem Vergleich von Figur 7 und Figur 8 in unserem Beispiel:

$$(C, V, 7) \quad |\chi(\underline{r}_1, \underline{r}_1)|^2 \sim \frac{1}{100} |G(\underline{r}_1, \underline{r}_1)|^2$$

Dieser Zahlenwert erklärt sich allgemeiner aus der Tatsache, daß in dem von uns betrachteten Massenzahlbereich die Stärke der Paarwechselwirkung bekanntlich so beschaffen ist, daß jeweils etwa 10% der Teilchen in ihrem Bereich liegen. Es wird daher bei Bildung der anomalen Dichte nur über etwa $\frac{1}{10}$ der Zustände summiert, die für die gemischte Dichte wichtig sind. Daraus ergibt sich für den betrachteten Massenzahlbereich stets ein Verhältnis von der obigen Größenordnung.

Zum Abschluß dieses Abschnitts bemerken wir noch, daß die bekannte Teilchenzahlunschärfe von $\{BCS\}$ sich auch auf die Dichten auswirkt. So ist für BCS-Dichten der allgemeine Zusammenhang (A, IV, 4) zwischen der $(k-1)$ - und der k -Teilchen-

dichte verletzt. Dies kann zu Fehlern führen, wenn man z.B. Erwartungswerte von Zweiteilchenoperatoren zu berechnen hat, welche formal in Einteilchenoperatoren entarten; je nachdem, ob man zur Berechnung σ_2^{BCS} oder σ_1^{BCS} heranzieht, gelangt man zu unterschiedlichen Resultaten.

Wir verwenden daher zur Lösung des Extremalprinzips nicht spezielle BCS-Dichten, nehmen jedoch im folgenden Abschnitt die am Beispiel von $|\text{BCS}\rangle$ für Paarzustände in Kernen als charakteristisch festgestellten Eigenschaften zum Ausgangspunkt für die Aufstellung eines schematischen Modells der runden Zwei- und Dreiteilchendichte, welches sich im Gegensatz zum BCS-Modell auf feste Teilchenzahlen bezieht.

2. Aufstellung eines schematischen Modells für die runde Zweiteilchendichte

Gesucht ist ein Modell für die Dichten, welches die bei der Diskussion von $|\text{BCS}\rangle$ festgestellten charakteristischen Eigenschaften von Paarungswellenfunktionen enthält, zugleich aber die Unzulänglichkeiten von BCS-Dichten (Teilchenzahlunschärfe, Verletzung des $\sigma_k - \sigma_{k-1}$ -Zusammenhangs) überwindet.

Wie wir im vorhergehenden Abschnitt gesehen haben, traten bei der BCS-Zweiteilchendichte neben dem unabhängige-Teilchen-Term $\sigma_1(1)\sigma_1(2)$ als charakteristische Korrelationsterme auf der gemischte-Dichte-Term, der vom Pauliprinzip herrührte und hinsichtlich der Dichte eine kurzreichweitige Korrelation darstellte, sowie der Paarungsterm, welcher als Dichtekorrelation Anteile kürzerer und längerer Reichweite enthielt. Wir können uns daher formal den Korrelationsterm in der BCS-Zweiteilchendichte, $\sigma_{2,\text{Kor}}(1,2) = -|\sigma(1,2)|^2 + |\chi(1,2)|^2$, aufgetrennt denken in einen Term $\sigma_{2,\text{Kor}}^{(K)}$, in welchem wir die kurzreichweitigen Anteile von gemischter Dichte und anomaler Dichte zusammenfassen, und in einen Term $\sigma_{2,\text{Kor}}^{(L)}$, der die verbleibenden längerreichweitigen Anteile der Korrelation enthält:

$$\sigma_2(1,2) = \sigma_1(1)\sigma_1(2) + \underbrace{\left[\sigma_{2,\text{Kor}}^{(K)}(1,2) + \sigma_{2,\text{Kor}}^{(L)}(1,2) \right]}_{\sigma_{2,\text{Kor}}(1,2)} .$$

(C,V,8)

Indem wir unseren Rahmen nun allgemeiner stecken und von der Betrachtung von BCS-Dichten abgehen, fassen wir (C,V,8)

als Ansatz für ein (schematisches) Modell der Zweiteilchendichte auf.*)

Die Forderung, daß dieser Ansatz den σ_2 - σ_1 -Zusammenhang korrekt wiedergeben soll, führt sofort auf die Bedingung:

$$(C, V, 9) \quad \int \sigma_{2, \text{Kor}}^{(1,2)} d\tau_2 = \int [\sigma_{2, \text{Kor}}^{(K)}(1,2) + \sigma_{2, \text{Kor}}^{(L)}(1,2)] d\tau_2 = -\sigma_1(1).$$

Ohne weitere Spezialisierungen des Modells lassen sich mit Hilfe der Bedingung (C, V, 9) Aussagen gewinnen über Integrale vom Typ $\int \sigma_{2, \text{Kor}}^{(K)} f(\underline{r}_1, \underline{r}_2) d\tau_1 d\tau_2$. Diese Integrale treten bei der Berechnung von Erwartungswerten mit σ_2 auf. (Die Funktionen f sollen dabei als hinreichend langsam veränderlich angenommen werden.)

Entsprechend seiner Definition nimmt $\sigma_{2, \text{Kor}}^{(K)}$ nur innerhalb eines um die Stelle $\underline{r}_1$ gelegten Korrelationsbereiches (von der Größenordnung etwa des Eigenvolumens $v_0 = V/N$ eines Teilchens) wesentlich von Null verschiedene Werte an. Für Funktionen, die über diesen Korrelationsbereich hinweg hinreichend langsam variieren, können wir im Integral die Funktion durch ihren Wert an der Stelle $\underline{r}_2 = \underline{r}_1$ ersetzen und erhalten nach Integration über die Koordinaten $\underline{r}_2$ mit Hilfe von (C, V, 9):

$$(C, V, 10) \quad \begin{aligned} \int \sigma_{2, \text{Kor}}^{(K)} f(\underline{r}_1, \underline{r}_2) d\tau_1 d\tau_2 &\approx \int \sigma_{2, \text{Kor}}^{(K)} f(\underline{r}_1, \underline{r}_1) d\tau_1 d\tau_2 = \\ &= -\int \sigma_1 f(\underline{r}_1, \underline{r}_1) d\tau_1 - \int \sigma_{2, \text{Kor}}^{(L)} f(\underline{r}_1, \underline{r}_1) d\tau_1 d\tau_2. \end{aligned}$$

*)

Die BCS-Zweiteilchendichte kann jedoch auch weiterhin zumindest als Anschauungsbeispiel für (C, V, 8) herangezogen werden.

Für Funktionen f , die der genannten Voraussetzung genügen, lassen sich Integrale über $\sigma_{2,\text{Kor}}^{(K)}$ somit zurückführen auf Integrale über σ_1 und $\sigma_{2,\text{Kor}}^{(L)}$. Der langreichweitige Anteil der Dichte bestimmt also die Wirkung des kurzreichweitigen Anteils der Dichte, so daß in den obigen Fällen zur Berechnung von Erwartungswerten mit der Zweiteilchendichte die explizite Kenntnis von $\sigma_{2,\text{Kor}}^{(K)}$ nicht notwendig ist.

Es verbleibt, geeignete Ansätze für σ_1 und $\sigma_{2,\text{Kor}}^{(L)}$ zu formulieren (wegen (C,V,10) ist dann über den kurzreichweitigen Anteil der Dichte in integraler Weise verfügt).

Die Einteilchendichte nehmen wir (im Sinne eines einfachen Ansatzes) wieder als konstant an.

Was $\sigma_{2,\text{Kor}}^{(L)}$ anbetrifft, so hat der allgemeinste Ansatz hierfür, da wir nach wie vor runde Systeme betrachten, eine Entwicklung der Form:

$$(C,V,11) \quad \sigma_{2,\text{Kor}}^{(L)}(r_1, r_2) = \sum_{\ell} h_{\ell}(r_1, r_2) [Y_{\ell}(\Omega_1) \times Y_{\ell}(\Omega_2)]^{\circ}.$$

Zur Veranschaulichung können wir wiederum die längerreichweitigen Anteile der BCS-Zweiteilchendichte heranziehen, welche durch die anomale Dichte bewirkt wurden. Die Radialfunktionen in der zu (C,V,11) analogen Entwicklung der anomalen Dichte hingen dabei von den jeweiligen Drehimpulsschalen ab, welche bei einem speziellen Kern im Bereich der Paarung lagen.

Allgemein hängt die genaue Form der Entwicklungsfunktionen h_l sicherlich ebenfalls von dem speziell betrachteten Atomkern und der wirksamen Zweiteilchenwechselwirkung ab. Da wir jedoch an Aussagen nicht nur für einen speziellen Atomkern, sondern für einen ganzen Massenzahlbereich interessiert sind, ist etwa daran zu denken, die h_l in $(C,V,11)$ unabhängig von dem speziellen Atomkern versuchsweise als konstante Koeffizienten anzusetzen. Nach Lösung des Extremalprinzips kann man die h_l so bestimmen, daß die empirischen Trägheitsmomente wiedergegeben werden.

Infolge der in der Entwicklung $(C,V,11)$ auftretenden Winkelabhängigkeiten ergibt sich dabei jedoch - ähnlich wie bei der Diskussion des BCS-Falls - keine eindeutige Aussage über die Struktur der zugrundeliegenden Zweiteilchenkorrelation.

Unterdrücken wir in $(C,V,11)$ dagegen in einfachster Näherung auch alle Winkelabhängigkeiten, wählen wir also

$$(C,V,12) \quad \sigma_{2,Kor}^{(L)}(1,2) = \frac{h_0}{4\pi} = \text{const.},$$

so haben wir einen Fall vor uns, mit dem wir von vorneherein eine gewisse physikalische Vorstellung verknüpfen können: der Ansatz $(C,V,12)$ entspricht der (plausiblen) Idee, daß die Dichtekorrelation außerhalb des Nahbereichs von Teilchen 1 unabhängig vom speziellen Ort von Teilchen 2 ist.

Wir werden im weiteren nur den Ansatz $(C,V,12)$ betrachten.

3. Aufstellung eines schematischen Modells für die runde Dreiteilchendichte

Das Vorgehen beim Ansatz der Dreiteilchendichte erfolgt analog zum Fall der Zweiteilchendichte.

Wir gehen wiederum aus von der BCS-Dreiteilchendichte (sh. (C,V, 5)). Denken wir uns den dort auftretenden Zweiteilchenkorrelationsterm (zweite Zeile von (C,V, 5)) wie in (C,V, 8) ausgeschrieben, und den Dreiteilchenkorrelationsterm $\sigma_{3, \text{Kor}} = (\sigma(1,2) \sigma(2,3) \sigma(3,1) + \text{sym.}) + (\sigma(1,2) \chi^\dagger(2,3) \chi(3,1) + \text{sym.})$ ebenso in kurz- und langreichweitigen Anteil aufgespalten, so erhalten wir zunächst formal für die BCS-Dreiteilchendichte :

$$\begin{aligned} \sigma_3(1,2,3) &= \sigma_1(1) \sigma_1(2) \sigma_1(3) \\ (C,V, 13) \quad &+ [\sigma_1(1) \sigma_{2, \text{Kor}}(2,3) + \text{sym.}] \\ &+ [\sigma_{3, \text{Kor}}^{(K)}(1,2,3) + \sigma_{3, \text{Kor}}^{(L)}(1,2,3)] . \end{aligned}$$

In Verallgemeinerung dieses für die BCS-Dreiteilchendichte gewonnenen Ausdrucks fassen wir (C,V,13) wiederum als Ansatz für ein (schematisches) Modell einer runden Dreiteilchendichte auf.

Die Forderung des korrekten σ_3 - σ_2 - Zusammenhangs (σ_2 wie in (C,V, 8) angesetzt) führt hier auf:

$$(C,V, 14) \quad \int [\sigma_{3, \text{Kor}}^{(K)}(1,2,3) + \sigma_{3, \text{Kor}}^{(L)}(1,2,3)] d\tau_3 = -2 \sigma_{2, \text{Kor}}(1,2) .$$

Für hinreichend langsam veränderliche Funktionen $g(r_1, r_2, r_3)$ leitet man aus (C,V,14) die Integralbeziehung

$$(C,V,15) \quad \int \sigma_{3,Kor}^{(K)} g(r_1, r_2, r_3) d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 = \\ -2 \int \sigma_1^{(1)} g(r_1, r_1, r_1) d\tau_1 - \int \sigma_{3,Kor}^{(L)}(1,2,3) g(r_1, r_1, r_1) d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3.$$

ab, mit deren Hilfe $\sigma_{3,Kor}^{(K)}$ bei der Berechnung von Erwartungswerten mit der Dreiteilchendichte in den obigen Fällen aus unserem Ansatz eliminiert werden kann.

Da über die außerdem in der Dreiteilchendichte (C,V,13) auftretenden Terme $\sigma_1, \sigma_{2,Kor}$ bereits in C.V.2. verfügt wurde, verbliebe somit nur noch ein Ansatz für $\sigma_{3,Kor}^{(L)}$. Wegen der Drehinvarianz des Systems wäre ein Ansatz analog zu (C,V,11) möglich, bei welchem $\sigma_{3,Kor}^{(L)}$ nach einem, durch Drehimpulskopplung von Kugelfunktionen zu $L = 0$ gewonnenen, bezüglich der Winkel vollständigen Funktionensystem entwickelt wird. Die r-abhängigen Entwicklungsfunktionen könnten wieder im Sinne eines einfachen Ansatzes zunächst durch konstante Koeffizienten ersetzt werden.

Es wird sich jedoch bei der Durchführung des Extremalprinzips zeigen, daß bei den uns interessierenden Rechnungen $\sigma_{3,Kor}^{(L)}$ - Integrale in erster Näherung vernachlässigt werden können,^{*)} so daß wir an dieser Stelle keinen speziellen Ansatz für $\sigma_{3,Kor}^{(L)}$ zu formulieren brauchen.

*) Dasselbe gilt auch für die Beiträge von $\sigma_{2,Kor}^{(L)}$ zu Erwartungswerten, die mit der Zweiteilchendichte (C,V,8) ausgerechnet werden. Nicht vernachlässigbar sind dagegen die Beiträge von $\sigma_{2,Kor}^{(L)} \cdot \sigma_1$ zu Integralen über die Dreiteilchendichte (C,V,13), so daß der Ansatz (C,V,12) für $\sigma_{2,Kor}^{(K)}$ nötig bleibt.

4. Diskussion der Produktbeziehungen

Bevor wir mit dem in den vorhergehenden Kapiteln aufgestellten Modell für die Zwei- und Dreiteilchendichte in das Extremalprinzip eingehen können, müssen wir überprüfen, ob oder unter welchen Voraussetzungen die Produktbeziehungen für Erwartungswerte, die in Teil A.III. der Herleitung des Extremalprinzips der spezifischen Entkopplung in seiner Form (A,III,11) zugrundegelegt wurden, im Rahmen dieses Modells der Dichten gegeben sind.

Wir untersuchen etwa den Erwartungswert des Produkts der Einteilchenoperatoren $F = \sum_{i=1}^N f(\underline{r}_i)$, $G = \sum_{i=1}^N g(\underline{r}_i)$; *

$$(C,V,16) \quad \langle F \cdot G \rangle^{(o)} = \int \sigma_1^{(o)} f(\underline{r}_1) g(\underline{r}_2) d\underline{r}_1 d\underline{r}_2 + \int \sigma_1^{(o)} f(\underline{r}_1) g(\underline{r}_1) d\underline{r}_1$$

Setzen wir die runde Dichte $\sigma_2^{(o)}$ von (C,V,8) ein, so erhalten wir unter Verwendung der Beziehung (C,V,10): **

$$(C,V,17) \quad \langle F \cdot G \rangle^{(o)} = \left(\int \sigma_1^{(o)} f(\underline{r}_1) d\underline{r}_1 \right) \cdot \left(\int \sigma_1^{(o)} g(\underline{r}_2) d\underline{r}_2 \right) = \langle F \rangle^{(o)} \langle G \rangle^{(o)}$$

(bis auf Beiträge von $\sigma_2^{(L)}$, $\sigma_{Kor}^{(L)}$). Für die mit den runden Dichten berechneten Erwartungswerte gilt also die Produktbeziehung.

*) Zur Unterscheidung gegenüber den mit deformierten Dichten σ_2^{def} , σ_1^{def} berechneten Erwartungswerten $\langle F \cdot G \rangle^{def}$ schreiben wir $\langle F \cdot G \rangle^{(o)}$, die runden Dichten bezeichnen wir in diesem Abschnitt wieder durch $\sigma_2^{(o)}$, $\sigma_1^{(o)}$.

**) Wir setzen dabei implizit voraus, daß F und G die der Beziehung (C,V,10) zugrundeliegende Voraussetzung erfüllen.

Gehen wir nun über zu deformierten Dichten durch die in C.IV. beschriebene Ersetzung $r_i \rightarrow \frac{r_i}{1+\beta Y_{2,0}(i)}$ in den runden Dichten, und denken wir uns die deformierten Dichten entwickelt nach Potenzen von β , so folgen für die mit den deformierten Dichten berechneten Erwartungswerte die Entwicklungen:

$$\begin{aligned} \langle F \cdot G \rangle^{\text{def}} &= \langle F \cdot G \rangle^{(0)} + \beta \cdot \langle F \cdot G \rangle^{(1)} + \dots \\ (C,V,18) \quad \langle F \rangle^{\text{def}} \langle G \rangle^{\text{def}} &= \langle F \rangle^{(0)} \langle G \rangle^{(0)} + \beta \cdot \dots + \dots \end{aligned}$$

Falls $0 \neq \langle F \rangle^{(0)} \langle G \rangle^{(0)} (= \langle F \cdot G \rangle^{(0)})$ gilt, sind die weiteren Entwicklungsterme in (C,V,18) vernachlässigbar, so daß wir in diesem Fall von einer näherungsweisen Gültigkeit der Produktbeziehung auch für die mit den deformierten Dichten berechneten Erwartungswerte sprechen können.

Falls jedoch $0 = \langle F \rangle^{(0)} \langle G \rangle^{(0)} (= \langle F \cdot G \rangle^{(0)})$ gilt, muß die wesentliche Aussage der Produktbeziehung in den Zusatzgliedern der Entwicklung (C,V,18) von der Ordnung β oder höher enthalten sein.

Die Zusammenhänge lassen sich genauer untersuchen anhand der speziellen Einteilchenoperatoren $F = \sum_{i=1}^N f(r_i) \cdot Y_{l_1,0}(\Omega_i)$, $G = \sum_{i=1}^N g(r_i) \cdot Y_{l_2,0}(\Omega_i)$. Die Ergebnisse der Durchrechnung dieses Beispiels in Anhang D.IV. sind in Tabelle 1 wiedergegeben (siehe nächste Seite).

Aus der letzten Spalte der Tabelle liest man für die jeweiligen l_1, l_2 -Werte als Bedingungen der näherungsweisen Gültigkeit der Produktbeziehung für die mit den deformierten

l_1	l_2	$\langle F \rangle^{\text{def}} \langle G \rangle^{\text{def}} \sim$	$\frac{\langle FG \rangle^{\text{def}} - \langle F \rangle^{\text{def}} \langle G \rangle^{\text{def}}}{\langle F \rangle^{\text{def}} \langle G \rangle^{\text{def}}} \sim$
2	0	$N^2 \beta + \dots$	$\frac{1}{N} + \frac{\beta}{N} + \dots$
2	2	$N^2 \beta^2 + \dots$	$\frac{1}{N\beta} + \frac{1}{N} + \dots$
4	0	$N^2 \beta^2 + \dots$	$\frac{1}{N\beta} + \frac{1}{N} + \dots$
4	2	$N^2 \beta^3 + \dots$	$\frac{1}{N\beta^2} + \frac{1}{N\beta} + \dots$
4	4	$N^2 \beta^4 + \dots$	$\frac{1}{N\beta^3} + \frac{1}{N\beta^2} + \dots$
usw.			

Tab. 1: Zur Diskussion der Produktbeziehung

(Bem.: Stets gilt dabei $\langle F \rangle^{(0)} \cdot \langle G \rangle^{(0)} = 0$.)

Dichten berechneten Erwartungswerte ab: $\frac{1}{N} \ll 1, \frac{1}{N\beta} \ll 1, \frac{1}{N\beta^2} \ll 1$ usw..

Da für $\beta \sim 0.3$, $N \sim 125$ bereits $N\beta^3 \approx 1$ ist, ersieht man aus Tabelle 1 zugleich, daß die Produktformel für höhere l -Werte nicht einmal mehr näherungsweise gelten kann. Dies ist allerdings nicht verwunderlich, da für höhere l -Werte die $Y_{l,m}$ immer stärker oszillieren und somit - wenn wir an die in A.III.3. gegebene qualitative Begründung der Produkteigenschaft bei Fermionensystemen denken - über den Bereich, in dem sich im Mittel ein Teilchen befindet, nicht mehr hinreichend langsam variieren, und daher für höhere l -Werte ohnedies nicht eine Produktbeziehung zu erwarten ist.

Wir finden somit, daß für hinreichend langsam veränderliche lokale Einteilchenoperatoren F, G im Rahmen unseres Modells für die Zwei- und Dreiteilchendichte die Produktbeziehung $\langle F \cdot G \rangle^{\text{def}} = \langle F \rangle^{\text{def}} \cdot \langle G \rangle^{\text{def}}$ in der nullten Ordnung des Deformationsparameters β bis auf Beiträge von $\sigma_{2, \text{Kor}}^{(L)}$ gilt, und daß sie in den höheren Ordnungen von β näherungsweise erfüllt ist, wenn die Teilchenzahl hinreichend groß und die Deformation nicht zu klein ist.

VI. Lösung des Extremalprinzips für das schematische Modell der Dichten

1. Aufgabenstellung

Wir wollen unter Zugrundelegung des entwickelten schematischen Modells der Dichten das Extremalprinzip der spezifischen Entkopplung für den Zweiteilchenansatz, wie es durch (C,II,2) gegeben ist, lösen.

Da die gesuchten Funktionen S_1, S_2 in (C,II,2) vollständig voneinander entkoppeln, genügt es, das Extremalprinzip zunächst nur für eine der beiden Funktionen, etwa S_1 , zu betrachten. Zu lösen ist dann das mathematische Problem:

$$F(t_1) = \int \sigma_2^{\text{def}} (\nabla_{\mathbf{r}_1} t_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2))^2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 + \\ (C,VI,1) \int \sigma_3^{\text{def}} (\nabla_{\mathbf{r}_1} t_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)) \cdot (\nabla_{\mathbf{r}_1} t_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3)) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 \stackrel{!}{=} \min.,$$

Nebenbedingungen:

$$(C,VI,2) \int \sigma_2^{\text{def}} l_x t_1 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = 1 \quad \int \sigma_2^{\text{def}} l_y t_1 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = 0 .$$

Für den allgemeinsten Ansatz der Funktionen t_1 , der die Nebenbedingungen erfüllt und bei dem insbesondere jedes einzelne Entwicklungsglied einen echten Beitrag zu der durch (C,VI,2) ausgedrückten Nachführung der körpergebundenen ζ -Achse liefert, fanden wir in C. IV. als Folge des von uns vorausgesetzten Deformationscharakters der Dichten:

$$t_1(t_1, t_2) = \sum_{l_1 l_2} f_{l_1 l_2}(t_1, t_2) \operatorname{Im} [Y_{l_1}(\Omega_1) \times Y_{l_2}(\Omega_2)]_1^2$$

(C, VI, 3)

$$+ \text{sym.} ,$$

wobei die Summation durch die Bedingung $l_2 = l_1, l_1 \pm 2$
 $(l_2 \geq 0)$ eingeschränkt war (sh.(C, IV, 4)).

Da wir zur Lösung des Extremalprinzips unser schematisches Modell der Dichten zugrundelegen, ist es an dieser Stelle nicht sinnvoll, mit dem allgemeinen Ansatz (C, VI, 3) für t_1 in das Extremalprinzip einzugehen (dies wäre erforderlich, wenn für einen speziellen Kern die "wahren" Dichten gegeben wären).

Unsere Aufgabe hier wird vielmehr sein, zunächst einen vereinfachten Ansatz für t_1 einzuführen, dann die als konstant angesetzte langreichweitige Zweiteilchenkorrelation $\sigma_{2, \text{Kor}}^{(L)} = \frac{h_0}{4\pi}$ so zu bestimmen, daß die Lösung des Extremalprinzips die empirischen Trägheitsmomente im betrachteten Massenzahlbereich wiedergibt, und anschließend aus dem ermittelten Wert für h_0 Rückschlüsse auf die Struktur der wirksamen Zweiteilchenkorrelation zu ziehen.

Wir führen dieses Programm im folgenden Abschnitt durch.

2. Durchführung der Lösung

Wir fragen zunächst nach vereinfachten Ansätzen für t_1 .

Da dem Extremalprinzip in seiner Form (C,VI,1) die in C.V.4. diskutierten Produktbeziehungen zugrundeliegen, ist es nur sinnvoll, in dem Ansatz für t_1 solche Terme zu berücksichtigen, daß die Erfüllung der Produktbeziehungen durch diese Funktion sichergestellt ist. Dies bedeutet eine Einschränkung, die dem allgemeinen Ansatz (C,VI,3) für t_1 aufzuerlegen ist.

Nach C.VI.4. sind die gewünschten Produktbeziehungen unter der Voraussetzung $N\beta \gg 1$ gut erfüllt, wenn in den jeweiligen Winkelabhängigkeiten der Form $Y_{\ell,m}(\mathcal{V}_i, \varphi_i)$ ℓ nicht größer als 2 ist. Wenn wir uns also (im Sinne eines einfachen Ansatzes) darauf beschränken, in der Entwicklung (C,VI,3) l_1 und l_2 nicht größer als 2 zu wählen, so haben wir in (C,VI,3) nur noch die (l_1, l_2) - Kombinationen $(2,0)$, $(2,2)$, $(1,1)$ zu berücksichtigen.

Wir betrachten diese Entwicklungsglieder zunächst einzeln.

Im Fall $(l_1, l_2) = (2,0)$ hat der entsprechende Entwicklungsterm aus (C,VI,3) die Form:

$$(C,VI,4) \quad f_{2,0}(\tau_1, \tau_2) \operatorname{Im} [Y_2(\Omega_1) \times Y_0(\Omega_2)]_1^2 + \text{sym.} \sim \\ f_{2,0}(\tau_1, \tau_2) \operatorname{Im} Y_{2,1}(\Omega_1) + f_{2,0}(\tau_2, \tau_1) \operatorname{Im} Y_{2,1}(\Omega_2) .$$

Dieser Ausdruck unterscheidet sich von der beim Einteilchenansatz gefundenen Lösung nur durch seine Radialabhängigkeit. Im Rahmen des zugrundegelegten Modells der Dichten, bei welchem die Ortsabhängigkeit von $\sigma_{2,Kor}^{(L)}$ völlig unterdrückt ist, erscheint ein Ansatz für t_1 , bei dem der Unterschied vom Ein- zum Zweiteilchenansatz nur in die Radialabhängigkeit von (C,VI,4) gesteckt ist, nicht sinnvoll.

Wir wollen vielmehr die beim Einteilchenansatz gefundene Lösung (Hauptträgheitsachsen) als Anfangsglied einer Entwicklung von t_1 auffassen und wählen daher in (C,VI,4) $f_{2,0}(r_1, r_2) \sim r_1^2$. Die Mitnahme des zweiten Gliedes (mit $(\ell_1, \ell_2) = (2, 2)$) gibt dann eine echte Zweiteilchenkorrelation im Ansatz für t_1 . Da bei Hauptträgheitsachsen der Beitrag eines Teilchens zur Definition von γ quadratisch mit r geht, setzen wir für das zweite Glied in den Radien ebenfalls eine insgesamt quadratische Abhängigkeit voraus (zweites Glied also $\sim \tau_1 \tau_2 \text{Im} [\gamma_2(\Omega_1) \times \gamma_2(\Omega_2)]_1^2$). Da dritte Glied (mit $(\ell_1, \ell_2) = (1, 1)$), welches analog dazu in der Form $\sim r_1 r_2 \text{Im} [\gamma_1(\Omega_1) \times \gamma_1(\Omega_2)]_1^2$ anzusetzen ist, führt wiederum auf Hauptträgheitsachsen zurück und wird daher im weiteren nicht berücksichtigt.

Wir schreiben also:

$$(C, VI, 5) \quad t_1 = \underbrace{\alpha (\tau_1^2 \text{Im} \gamma_{2,1}(\Omega_1) + \text{sym.})}_{\sim (\gamma_1 z_1 + \gamma_2 z_2)} + \gamma \tau_1 \tau_2 \text{Im} [\gamma_2(\Omega_1) \times \gamma_2(\Omega_2)]_1^2.$$

*)
Es ist:
$$\sum_{i \neq j} \tau_i \tau_j \text{Im} [\gamma_i(\Omega_1) \times \gamma_j(\Omega_2)]_1^2 \sim \sum_{i \neq j} \gamma_i z_j = - \sum_i \gamma_i z_i$$

(wegen der Nebenbedingung $\sum_i \tau_i = 0$).

Die Größen α , γ sind in unserem Ansatz (C,VI, 5) noch offen und müssen aus dem Extremalprinzip bestimmt werden. Das dabei erhaltene, für die Definition der körpergebundenen $\mathfrak{J}$ -Achse maßgebliche Verhältnis γ/α wird dann zeigen, mit welchem Gewicht die einzelnen Terme in (C,VI, 5) zur Definition von $\mathfrak{J}$ beitragen.

Für den vereinfachten Lösungsansatz (C,VI, 5) kann nun die mathematische Lösung des Extremalprinzips (C,VI, 1) durchgeführt werden. Das Ergebnis hängt dabei von dem in unserem Modell der Dichten noch offenen Koeffizienten h_0 ab. Da sich für einen vorgegebenen Wert von h_0 das Resultat über das Extremalprinzip zwangsläufig ergibt, bestimmt h_0 den Einfluß der Zweiteilchenkorrelation auf das Resultat.

Bestimmt man h_0 so, daß das Extremalprinzip für das Trägheitsmoment die empirischen Werte richtig wiedergibt, so führt die detaillierte Rechnung, die wir hier nicht wiedergeben, zu dem in der Tabelle aufgeführten Resultaten.

Tabelle 2

$\frac{\Theta_{\text{eff}}}{\Theta_{\text{hydro}}}$	h_0 (in $\frac{1}{v^2}$)	$\bar{\alpha}_{\text{extr}} = \alpha \sqrt{\frac{N-1}{4\pi}}$	γ_{extr}	$(\gamma/\bar{\alpha})_{\text{extr}}$
3	-1.1	-0.81	1.89	-2.33
4	-0.75	-1.01	2.10	-2.08

Aus dem sich ergebenden Verhältnis $\gamma/\bar{\alpha}$ entnehmen wir, daß offensichtlich beide Terme in unserem Ansatz für t_1 in derselben Größenordnung zur Definition von $\mathfrak{J}$ beitragen.

Die Funktionen S_1 und S_2 sehen in kartesischen Koordinaten aus-
geschrieben wie folgt aus:

$$\begin{aligned}
 (C, VI, 7) \quad S_1 &= \sum_{i < j} t_1(r_i, r_j) = (\tilde{\alpha} - 2\tilde{\gamma}) \sum_i y_i z_i + \\
 &+ \tilde{\gamma} \sum_{i, j} \left[\frac{2 y_i z_i}{r_i} \cdot \frac{r_j^2 - 3 x_j^2}{r_j} + 6 \frac{x_i y_i}{r_i} \cdot \frac{x_j z_j}{r_j} \right] \\
 (C, VI, 8) \quad S_2 &= \sum_{i < j} t_2(r_i, r_j) = -(\tilde{\alpha} - 2\tilde{\gamma}) \sum_i x_i z_i - \\
 &- \tilde{\gamma} \sum_{i, j} \left[\frac{2 x_i z_i}{r_i} \cdot \frac{r_j^2 - 3 y_j^2}{r_j} + 6 \frac{x_i y_i}{r_i} \cdot \frac{y_j z_j}{r_j} \right] \\
 &(\tilde{\alpha} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \bar{\alpha}, \tilde{\gamma} = \frac{5}{16\pi} \sqrt{\frac{3}{2}} \gamma; \bar{\alpha}, \gamma \text{ sh. Tabelle 2}).
 \end{aligned}$$

Der für h_0 erhaltene Wert kann nun herangezogen werden, um
zu veranschaulichen, welche Art von Zweiteilchenkorrelation
(neben der Fermikorrelation) im Nahbereich vorliegt. Setzen
wir diese über das Korrelationsvolumen v_0 hinweg in einfach-
ster Näherung wiederum als konstant voraus, formal: $k_0 \cdot \Delta_{v_0}(1,2)$,
und schreiben wir für die Fermikorrelation $-\sigma_1^2 F(1,2)$
($F(1,2)$: die Form des Fermilochs darstellende Funktion), so
hat unsere Zweiteilchendichte die Gestalt:

$$(C, VI, 9) \quad \sigma_2 = \sigma_1^2 - \underbrace{\sigma_1^2 F(1,2) + k_0 \Delta_{v_0}(1,2)}_{\sigma_{2, \text{Kor}}^{(K)}} + \underbrace{\frac{h_0}{4\pi}}_{\sigma_{2, \text{Kor}}^{(L)}}.$$

k_0 und h_0 beschreiben die Veränderung der Dichte gegenüber
dem Fall unabhängiger Teilchen im Nah- bzw. Fernbereich.

(*) Dabei haben wir Summen über $i \neq j$ in solche über i, j umgeformt.
Wegen des zu S_1 korrespondierenden Ansatzes von S_2 vgl. (C, IV, 7).

(**) $\Delta_{v_0}(1,2) = 1$, wenn 1 und 2 innerhalb, $\Delta_{v_0}(1,2) = 0$, wenn sie
außerhalb von v_0 liegen).

Wie sich durch Integration von (C,VI, 9) über die Koordinaten von Teilchen 2 ergibt, hängen k_0 , h_0 über die Beziehung

$$(C,VI,10) \quad k_0 = \frac{-h_0}{4\pi} \cdot \frac{V}{V_0}$$

zusammen. In der Tabelle ist $h_0 < 0$. Negatives h_0 bedeutet nach (C,VI,10) im Nahbereich eine Teilchenanhäufung und im Fernbereich eine Verarmung, entspricht also einer kurzreichweitigen, anziehenden Wechselwirkung.

Wir fragen nun nach der absoluten Größe der Korrektur der Dichtekorrektur für den obigen Wert von h_0 .

Nehmen wir in (C,VI,10) v_0 von der Größenordnung $\frac{V}{N}$ an, so ergibt sich $k_0 \sim -h_0 \cdot N$. Setzen wir den für den betrachteten Massenzahlbereich ($N \sim 100$) ermittelten Wert für h_0 ein, so erhalten wir hier also $k_0 \sim + \frac{100}{V^2}$. Verglichen mit der Amplitude der Fermikorrektur ($\sim \frac{N^2}{V^2}$) ergibt sich hier k_0 von der Größenordnung $\frac{1}{100}$ der Amplitude der Fermikorrektur.

Wir gelangen somit zu dem Ergebnis, daß eine kurzreichweitige, anziehende Wechselwirkung zwischen den Nukleonen, die hinsichtlich der Zweiteilchendichte nur eine geringfügige Korrektur verursacht, in der Lage ist, über das Extremalprinzip der spezifischen Entkopplung und im Rahmen der von uns gemachten Ansätze das effektive Trägheitsmoment richtig wiederzugeben. Bemerkenswert ist, daß die durch die Wechselwirkung verursachte Dichtekorrektur im kurzreichweitigen Bereich von derselben Größenordnung ist, wie wir sie bei der Untersuchung der Dichten von BCS-Paarungswellenfunktionen gefunden haben.

Bei allen unseren Überlegungen hatten wir den Ansatz $\sigma_{2,Kor}^{(L)} = \frac{h_0}{4\pi}$ ins Auge gefaßt. Setzt man allgemeiner für $\sigma_{2,Kor}^{(L)}$ die Entwicklung (C,V,12) mit konstanten Koeffizienten h_l an, so zeigt sich, daß bei dem Ansatz (C,VI, 5) von t_1 neben h_0 auch der Koeffizient h_2 in das Resultat eingeht. Für die h_0 , h_2 -Werte, für die sich Trägheitsmomente ergeben, die um einen Faktor 3 - 4 größer als das hydrodynamische sind, erhält man dabei genähert einen linearen Zusammenhang (sh. Fig.9). Da wir diesem Fall keine physikalische Bedeutung zumessen können, wollen wir ihn an dieser Stelle nicht weiter verfolgen.

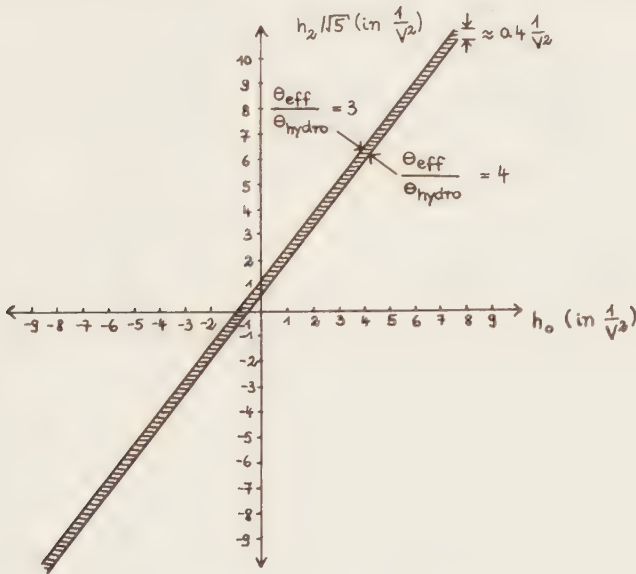


Fig. 9: Ausschnitt der h_0 , h_2 -Ebene.

In dem schraffierten Bereich ergeben sich Werte $\Theta_{eff}/\Theta_{hydro}$, die zwischen 3 und 4 liegen.

Wir diskutieren noch kurz die aus der Lösung des Extremalprinzips erhaltene Definition der spezifisch entkoppelnden $\mathcal{Y}$ -Achse.

Wie sich aus der in (C, VI, 7, 8) angegebenen funktionalen Gestalt von S_1 , S_2 ergibt, verschwinden diese, wenn man Konfigurationen betrachtet, in denen bei unveränderter z -Koordinate zu einem Massenpunkt x_i , y_i auch der mit $-x_i$, $-y_i$ auftritt. In diesem Fall ist die z -Achse zugleich Hauptträgheitsachse, die spezifisch entkoppelnde Achse stimmt für solche Punktkonfigurationen mit der Hauptträgheitsachse überein (sh. Fig. 10).

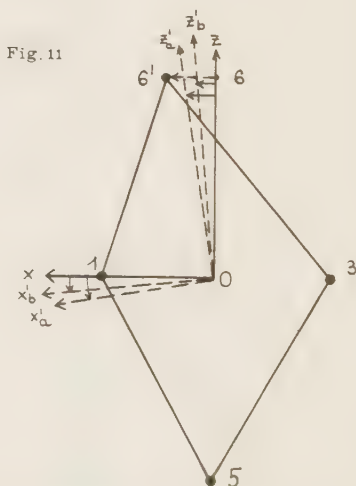
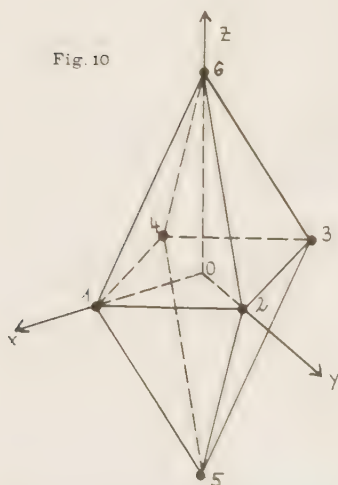


Fig. 10 u. 11: Definition der körpergebundenen $\mathcal{Y}$ -(hier = z -) Achse (o.B.d.A. Teilchenzahl $N = 6$).

Zu Fig. 11: a) Hauptträgheitsachse
b) Achse der spezifischen Entkopplung.

Den Fall, daß man von einer solchen Konfiguration abgeht, betrachten wir an dem in Fig.11 dargestellten Beispiel. Verschiebt man Teilchen 6 aus Fig.10 in Richtung der x-Achse, so wird die spezifisch entkoppelnde Achse weniger nachgeführt als die Hauptträgheitsachse.

Als Maß für die Nachführung der $\mathcal{J}$ -Achse wurden in A.I.2. die Mitführkoeffizienten eingeführt. Da diese quadratisch in das zu minimierende Funktional $\langle \Theta^{-1} \rangle$ eingehen, sind allgemein die Mitführkoeffizienten für die verbesserte Definition der körpergebundenen $\mathcal{J}$ -Achse kleiner als bei Definition von $\mathcal{J}$ als Hauptträgheitsachse. Unter diesem Gesichtspunkt ist es verständlich, daß sich in Fig.11 für die spezifisch entkoppelnde Achse ein kleinerer Nachführwinkel als für die Hauptträgheitsachse ergibt.

3. Schlußbemerkung

Wir haben in Teil C dieser Arbeit die allgemeine Form des Extremalprinzips der spezifischen Entkopplung für den Zweiteilchenansatz hergeleitet und zugleich Lösungsmethoden hierfür entwickelt.

In Ermangelung realistischer Zwei- und Dreiteilchendichten haben wir zu Modellen für die Dichten greifen müssen. Wir haben ein schematisches Modell für die Dichten aufgestellt, von dem wir annehmen können, daß es die Grundzüge von "wahren" Dichten hinreichend gut simuliert.

Wir haben innerhalb dieses schematischen Modells für einen speziellen Zweiteilchenansatz das Extremalprinzip der spezifischen Entkopplung gelöst und zeigen können, daß der Übergang vom Ein- zum Zweiteilchenansatz bei Berücksichtigung einer Korrelation in der Wellenfunktion, die in der Größenordnung mit der von BCS-Zuständen übereinstimmt, das Trägheitsmoment um den richtigen Faktor vergrößert. Aus diesem Ergebnis können wir darüber hinaus den Schluß ziehen, daß es nicht erforderlich ist, zu höheren Ansätzen (Dreiteilchenansatz usw.) weiterzugehen.

Das von Cranking-Modell-Rechnungen mit BCS-Wellenfunktionen [10,11] her bekannte Resultat, daß die Mitnahme von Zweiteilchenkorrelationen, insbesondere von Paarungskorrelationen, das Trägheitsmoment in die richtige Richtung schiebt, erfährt durch unsere Rechnung eine Bekräftigung insofern, als dieses Resultat hier von einer ganz anderen Seite her, nämlich aus-

gehend von einem Korrelationsansatz für die Bestimmungsfunktionen des körpergebundenen Systems, und auf der Grundlage einer sauberen Behandlung kollektiver Rotationen (ohne Verwendung von redundanten Variablen, von Drehimpulsprojektionsmethoden o.ä.) hergeleitet worden ist.

Die Tatsache, daß im Rahmen der in C.VI .2. durchgeführten einfachen Modellrechnung das Experiment bereits reproduziert zu werden vermag, kann als Ermutigung dafür angesehen werden, die spezifische Entkopplung innerhalb des von uns entwickelten Formalismus des Zweiteilchenansatzes für speziellere Modelle realistischer Dichten anhand entsprechender Ansätze genauer zu diskutieren.

Teil D

A n h a n g

I. Modellrechnung: mittlere Teilchenzahl pro Längeneinheit und Schwankung der mittleren Teilchenzahl pro Längeneinheit für ein eindimensionales Fermionensystem

Wir setzen N (zunächst als spinlos angenommene) Teilchen in die N energetisch tiefsten Zustände eines Periodizitätsintervalls der Länge L (Eigenzustände $\varphi_k = \frac{1}{\sqrt{L}} \cdot e^{ikx}$). Für die Einteilchendichte der entsprechenden Slaterdeterminante finden wir:

$$\sigma_1(x) = \sum_k \varphi_k^*(x) \cdot \varphi_k(x) = \frac{N}{L} = \text{const.}$$

Die zugehörige Zweiteilchendichte ergibt sich mit Hilfe der gemischten Dichte $\sigma(x, x') = \sum_k \varphi_k^*(x) \varphi_k(x') = -\frac{N}{L} \cdot \frac{\sin k_0(x-x')}{k_0(x-x')}$ zu:

$$(D, I, 1) \quad \sigma_2(x, x') = \sigma_1(x) \sigma_1(x') - |\sigma(x, x')|^2 = \frac{N^2}{L^2} \left(1 - \frac{\sin^2 k_0(x-x')}{k_0^2(x-x')^2} \right)$$

($k_0 = N\pi/L$ Fermiwellenzahl; für den Fall, daß man den Spin mitberücksichtigt, steht vor dem zweiten Term in der Klammer der Faktor $\frac{1}{2}$, außerdem ist dann $k_0 = \frac{N\pi}{2L}$).

Wir führen nun formal den Operator $\hat{N}_h(x_0)$ der mittleren Teilchenzahl im Intervall $[x_0 - \frac{h}{2}, x_0 + \frac{h}{2}]$ ein:

$$(D, I, 2) \quad \hat{N}_h(x_0) = \sum_{i=1}^N \Delta_h(x_i - x_0),$$

$$(\Delta_h(x - x_0) = 1 \text{ für } |x - x_0| \leq \frac{h}{2}, \text{ sonst } \Delta_h(x - x_0) = 0),$$

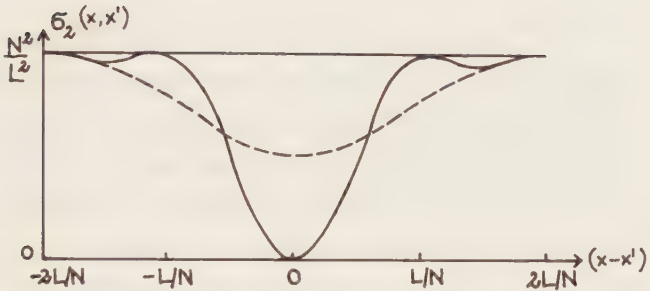


Fig. 12: Zweiteilchendichte für das verwendete ein-dimensionale Modell;
durchgezogene Linie: ohne Spin,
gestrichelte Linie: mit Spin.

und erhalten für die mittlere Teilchenzahl im Intervall der Länge h um x_0 :

$$\langle \hat{N}_h(x_0) \rangle = \int G_1(x) \Delta_h(x - x_0) dx = \frac{h}{L} \cdot N.$$

In einer Einheitszelle der Länge $h = \frac{L}{N}$ befindet sich somit im Mittel jeweils ein Teilchen. Wie Figur 12 zeigt, ist die Wahrscheinlichkeit, in diesem Bereich ein weiteres Teilchen zu finden, als Folge des Pauliprinzipis sehr klein.

Das Schwankungsquadrat der mittleren Teilchenzahl ist allgemein gegeben durch

$$\langle (\Delta \hat{N}_h)^2 \rangle = \langle (\hat{N}_h - \langle \hat{N}_h \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{N}_h^2 \rangle - \langle \hat{N}_h \rangle^2.$$

Setzen wir $\hat{N}_h$ ein, so erhalten wir nach kurzer Rechnung (unter Verwendung von $(\Delta_h(x - x_0))^2 = \Delta_h(x - x_0)$):

$$(D, I, 3) \quad \langle (\Delta \hat{N}_h)^2 \rangle = \int \tilde{G}_2(x, x') \Delta_h(x - x_0) \Delta_h(x' - x_0) dx dx' + \langle \hat{N}_h \rangle - \langle \hat{N}_h \rangle^2.$$

In Tabelle 3 sind die absoluten und relativen Schwankungen der mittleren Teilchenzahl für einige Werte von $\langle \hat{N}_h \rangle$ (bzw. h) angegeben. Die Ergebnisse in Spalte a sind aus (D,I,3) mit der Zweiteilchendichte (D,I,2) berechnet worden; Spalte b gibt den Fall wieder, daß wir den Spin mitberücksichtigen; zum Vergleich enthält die Tabelle in Spalte c auch die Werte, die sich aus (D,I,3) für konstante Zweiteilchendichte (also unkorrelierte Teilchen) ergeben.

Es zeigt sich, daß die Schwankung der mittleren Teilchenzahl bei über das Pauliprinzip korrelierten Teilchen jeweils deutlich unter dem Wert liegt, der sich für unkorrelierte Teilchen ergibt.

h	$\langle \hat{N}_h \rangle$	$\sqrt{\langle (\Delta \hat{N}_h)^2 \rangle}$			$\sqrt{\langle (\Delta \hat{N}_h)^2 \rangle} / \langle \hat{N}_h \rangle$		
		a	b	c	a	b	c
L/N	1	0.59	0.75	1.00	0.59	0.75	1.00
2L/N	2	0.65	0.83	1.41	0.32	0.42	0.71
4L/N	4	0.70	0.91	2.00	0.17	0.23	0.50
.	.	.	.	.	.	.	.
.	.	.	.	.	.	.	.
.	.	.	.	.	.	.	.
L	N	0	0	0	0	0	0

Tab. 3: Absolute und relative Schwankung der mittleren Teilchenzahl $\langle \hat{N}_h \rangle$ im Intervall der Länge h:

- a) $\sigma_2(x, x')$ wie in Fig. 12 (ohne Spin),
- b) $\sigma_2(x, x')$ wie in Fig. 12 (mit Spin),
- c) $\sigma_2(x, x') = N(N-1)/L^2$ (unkorrelierte Teilchen).

Denkt man sich somit ein Fermionensystem eingeteilt in gleich große Zellen, in denen im Mittel genau ein Teilchen zu finden ist, so können wir aus dem vorigen den Schluß ziehen, daß infolge der geringen Schwankung der Teilchenzahl innerhalb der Zellen die Gesamtwellenfunktion Ψ des Systems nur für solche Koordinatensätze wesentlich von Null verschieden ist, welche Konfigurationen entsprechen, bei denen sich je ein Teilchen innerhalb einer Zelle aufhält.

II. Herleitung der Einteilchendichten, welche beim Einteil- chenansatz auf Hauptträgheitsachsen führen

Wir fragen nach der Klasse axialsymmetrischer Einteilchendichten $\sigma_1(r, \vartheta)$, welche beim Einteilchenansatz Hauptträgheitsachsen liefern. Das Extremalprinzip (B, II, 2) führt für $s_1(\underline{r})$ auf die Euler-Lagrange-Gleichungen:

$$(D, II, 1) \quad \operatorname{div}(\sigma_1 \nabla s_1) - \lambda_1 \ell_x \sigma_1 - \lambda_2 \ell_y \sigma_1 = 0,$$

wobei die Nebenbedingungen (B, II, 3) durch Lagrangemultiplikatoren λ_1, λ_2 angekoppelt worden sind.

Geht man mit $s_1 = A \cdot yz$ (γ Hauptträgheitsachse) in (D, II, 1) ein, so ergibt sich nach kurzer Rechnung $\lambda_2 = 0$ sowie:

$$(D, II, 2) \quad r \sin 2\vartheta \frac{\partial \sigma_1}{\partial r} + \frac{\partial \sigma_1}{\partial \vartheta} (\cos 2\vartheta - \mu) = 0,$$

(wo wir zur Abkürzung $\mu = -\lambda_1/A$ gesetzt haben).

Die Aufintegration der Gleichung der Charakteristiken dieser linearen partiellen Differentialgleichung in zwei Variablen,

$$\frac{dr}{r \sin 2\vartheta} = \frac{d\vartheta}{\cos 2\vartheta - \mu},$$

führt mit den Anfangsbedingungen $r(\vartheta=0) = r_0$ (> 0) nach einigen Umformungen auf:

$$r(\vartheta) = \frac{r_0 \sqrt{\frac{\mu-1}{\mu+1}}}{\sqrt{1 - \frac{2}{\mu+1} \cos^2 \vartheta}},$$

welches die Gleichung eines Ellipsoids darstellt (vgl. die

entsprechende Diskussion in B.III.2.).

Der Parameter μ ist wie folgt bestimmt. Multiplikation von (D,II,1) mit s_1 und Aufintegration führt (unter Beachtung von $\lambda_2 = 0$) auf:

$$\int \sigma_1 (\nabla s_1)^2 d\tau = -\lambda_1 \int s_1 \cdot l_x \sigma_1 d\tau = +\lambda_1 \int \sigma_1 \cdot l_x s_1 d\tau = \lambda_1.$$

Für A folgt aus den Nebenbedingungen:

$$A = \left(\int \sigma_1 l_x (yz) d\tau \right)^{-1} = \left(\int \sigma_1 (y^2 - z^2) d\tau \right)^{-1}.$$

Also ist:

$$\mu = -\frac{\lambda_1}{A} = \frac{\int \sigma_1 (y^2 + z^2) d\tau}{\int \sigma_1 (z^2 - y^2) d\tau}$$

(wegen der Diskussion von μ siehe ebenfalls B.III.2.).

Ist F eine beliebige Funktion einer Variablen, so ergibt sich die allgemeine Lösung von (D,II,2) nach dem vorigen zu:

$$\sigma_1(\tau, \vartheta) = F\left(\frac{\tau \sqrt{1 - \frac{2}{\mu+1} \cos^2 \vartheta}}{\tau_0 \sqrt{\frac{\mu-1}{\mu+1}}}\right)$$

(Flächen konstanter Dichte: Ellipsoide).

Damit ist die Klasse von axialsymmetrischen Einteilchendichten bestimmt, welche beim Einteilchenansatz $\int$ als Hauptträgheitsachse liefern.

III. Herleitung der anomalen Dichte für nach Spin und Drehimpuls klassifizierte Basiszustände

Der allgemeine Ausdruck für die anomale Dichte $\chi(1,2)$ ist durch (C,V,4) gegeben. Wir untersuchen in diesem Abschnitt, was sich für die anomale Dichte ergibt, wenn man in (C,V,4) mit Produktfunktionen aus Ort und Spin eingeht:

$$(D,III,1) \quad \psi_k(1) = \varphi_{nlm}(r_1) \cdot \chi_{\frac{1}{2},s_z}(1) = R_{nl}(r_1) Y_{lm}(\Omega_1) \chi_{\frac{1}{2},s_z}(1).$$

Die Klassifikation der Zustände ψ_k berücksichtigt offenbar die Symmetrien der hier zugrundegelegten "runden" Teilchensysteme (mit Spin) in der richtigen Weise.

Für die Quantenzahlen $k = \{n \ell m, s_z\}$ setzen wir fest:

$$k > 0: \quad s_z = +\frac{1}{2}, \quad n \ell m \text{ beliebig.}$$

Für den zu ψ_k (mit $k > 0$) zeitgespiegelten Zustand ist dann:

$$\psi_{-k}(1) = K \psi_k(1) = \varphi_{nlm}^*(r_1) \cdot \chi_{\frac{1}{2},s_z=-\frac{1}{2}}(1) \quad *$$

Setzen wir dies in (C,V,4) ein, so erhalten wir den für die Zweiteilchendichte interessierenden Ausdruck $|\chi(1,2)|^2$ (nach Integration über die Spinkoordinaten) zu: $|\chi(1,2)|^2 = 2 \cdot |\chi_{\text{ort}}(r_1, r_2)|^2$ mit

$$(D,III,2) \quad \chi_{\text{ort}}(r_1, r_2) = \sum_{n\ell} u_{n\ell} v_{n\ell} R_{n\ell}^*(r_1) R_{n\ell}(r_2) \frac{2\ell+1}{4\pi} P_\ell(\cos \vartheta_{12}).$$

*)

K: Operator der Zeitumkehr, bei Spin $-\frac{1}{2}$ - Teilchen ist

$K = -i\sigma_y K_0$ (K_0 : komplexe Konjugation), vgl. z.B. Messiah [27]

Die Besetzungswahrscheinlichkeiten u und v haben wir dabei als von m und s_z unabhängig angenommen. Für $|\chi(1,2)|^2$ folgt die Entwicklung:

$$|\chi(1,2)|^2 = \sum_L C_L(r_1, r_2) [Y_L(\Omega_1) \times Y_L(\Omega_2)]_0^0 = \sum_L C_L(r_1, r_2) (-1)^L \sqrt{2L+1} \frac{1}{4\pi} P_L(\cos \vartheta_{12}),$$

wo die Entwicklungsfunktionen $C_L(r_1, r_2)$ durch $R_{n\ell}(r)$, $u_{n\ell}$, $v_{n\ell}$ ^(*) gegeben sind. Eine Entwicklung von ähnlicher Art ergibt sich auch, wenn man von Zuständen ausgeht, welche die aus dem Schalenmodell des Atomkerns (mit Spin - Bahn - Wechselwirkung) fließende $(n \ell j m_j)$ - Klassifikation aufweisen. Mit (D,III,2) ist die allgemeine mathematische Form der anomalen Dichte für drehimpulsklassifizierte Zustände hergeleitet. Eine Veranschaulichung von χ_{ort} am Beispiel von Oszillatorzuständen findet sich in C.V.1. .

^(*)
Es ist :
$$C_L(r_1, r_2) = \sum_{n\ell, n'\ell'} u_{n\ell} v_{n\ell} u_{n'\ell'} v_{n'\ell'} R_{n\ell}^*(r_1) R_{n\ell}(r_2) R_{n'\ell'}(r_1) R_{n'\ell'}^*(r_2) \cdot (-1)^{\ell+\ell'} \frac{(2\ell+1)(2\ell'+1)}{4\pi} \sqrt{2L+1} \cdot \begin{pmatrix} \ell & \ell' & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2.$$

IV. Zur Diskussion der Produktbeziehungen beim schematischen Modell der Dichten

Gegeben ist die runde Zweiteilchendichte $\sigma_2^{(o)}$ von C.V.2. und die dazugehörige Einteilchendichte $\sigma_1^{(o)}$; deformierte Dichten $\sigma_2^{\text{def}}, \sigma_1^{\text{def}}$ erzeugen wir hieraus wie in C.IV.1. beschrieben. Wir fragen nach der Gültigkeit der Produktbeziehung $\langle F \cdot G \rangle^{\text{def}} = \langle F \rangle^{\text{def}} \cdot \langle G \rangle^{\text{def}}$ für Einteilchenoperatoren $F = \sum_i f(r_i) \cdot Y_{l_i,0}(\Omega_i)$, $G = \sum_i g(r_i) \cdot Y_{l_i,0}(\Omega_i)$. In dem uns interessierenden Fall $\langle F \rangle^{\text{def}} \langle G \rangle^{\text{def}} \neq 0$ ($\Rightarrow l_1, l_2$ gerade) dürfen wir bilden:

$$(D, IV, 1) \quad \frac{\langle FG \rangle^{\text{def}} - \langle F \rangle^{\text{def}} \langle G \rangle^{\text{def}}}{\langle F \rangle^{\text{def}} \langle G \rangle^{\text{def}}}.$$

Wir betrachten zunächst den Nenner. Aus

$$\langle F \rangle^{\text{def}} = \int \sigma_1^{\text{def}} f Y_{l_1,0} d\tau = \int (\sigma_1^{(o)} + \beta Y_{2,0} \sigma_1^{(1)} + \beta^2 Y_{2,0}^2 \sigma_1^{(2)} + \dots) f Y_{l_1,0} d\tau$$

liest man als Größenordnung der ersten nichtverschwindenden Beiträge ab:

l_1	0	2	4	...
$\langle F \rangle^{\text{def}} \sim$	N	$N\beta$	$N\beta^2$	...

(D, IV, 2)

(analog $\langle G \rangle^{\text{def}}$).

Für den Zähler haben wir zunächst (wie oben entwickeln wir $\sigma_2^{\text{def}}, \sigma_1^{\text{def}}$ sogleich nach Potenzen von β):

$$\langle FG \rangle^{\text{def}} - \langle F \rangle^{\text{def}} \langle G \rangle^{\text{def}} =$$

$$(D, IV, 3) \quad \int \left\{ \sigma_2^{(o)} - \beta [Y_{2,0}(\Omega_1) \tau_1 \frac{\partial}{\partial \tau_1} + Y_{2,0}(\Omega_2) \tau_2 \frac{\partial}{\partial \tau_2}] \sigma_2^{(o)} + \dots \right\} \cdot f(r_1) g(r_2) Y_{l_1,0}(\Omega_1) Y_{l_2,0}(\Omega_2) d\tau_1 d\tau_2 +$$

(I)

$$\textcircled{\text{II}} + \int (\delta_1^{(0)} - \beta Y_{2,0} r \frac{\partial}{\partial r} \delta_1^{(0)} + \dots) f(r) g(r) Y_{l_1,0}(\Omega) Y_{l_2,0}(\Omega) d\tau -$$

$$\textcircled{\text{III}} - \left[\int (\delta_1^{(0)} - \beta Y_{2,0} r \frac{\partial}{\partial r} \delta_1^{(0)} + \dots) f(r) Y_{l_1,0}(\Omega) d\tau \right] \cdot \left[\begin{smallmatrix} f, g \\ l_1, l_2 \end{smallmatrix} \text{ vertauscht} \right].$$

Wie in C.V.4. gezeigt, kompensieren sich dabei die Beiträge in der Ordnung β^0 . Wir betrachten die nächsthöheren Terme einzeln.

Für $\textcircled{\text{II}}$ gilt offenbar: $\textcircled{\text{II}} \sim N\beta \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 + o(N\beta^2)$.

Aus $\textcircled{\text{III}}$ ergibt sich in der Ordnung β^1 :

$$\textcircled{\text{III}} = -\beta \sqrt{4\pi} \left[\delta_{l_1,2} \delta_{l_2,0} \int \delta_1^{(0)} \frac{\partial}{\partial r} (f \cdot r^3) d\tau \cdot \int \delta_1^{(0)} g \cdot r^2 d\tau + \begin{smallmatrix} f, g \\ l_1, l_2 \end{smallmatrix} \text{ vertauscht} \right].$$

(D, IV, 4)

Für $\textcircled{\text{I}}$ erhalten wir in der Ordnung β nach einigen Umformungen (mit $\sigma_2^{(0)} = \sum_l C_l(\tau_1, \tau_2) [Y_l(\Omega_1) \times Y_l(\Omega_2)]^0$) :

$$\textcircled{\text{I}} = +\beta \left[\frac{(-1)^{l_2}}{\sqrt{2l_2+1}} \langle Y_{2,0} | Y_{l_1,0} | Y_{l_2,0} \rangle \int C_{l_2} \frac{\partial}{\partial r_1} (r_1^3 f(r_1)) \cdot g(r_2) r_2^2 d\tau_1 d\tau_2 + \begin{smallmatrix} f, g \\ l_1, l_2 \end{smallmatrix} \text{ vertauscht} \right].$$

(D, IV, 5)

Verwendet man nun die aus $\langle F \cdot G \rangle^{(0)} = \langle F \rangle^{(0)} \langle G \rangle^{(0)}$ folgenden Beziehungen:

$$l > 0 \quad \int C_l(\tau_1, \tau_2) \phi(\tau_1, \tau_2) r_1^2 r_2^2 d\tau_1 d\tau_2 = (-1)^{l+1} \sqrt{2l+1} \int \delta_1^{(0)} \phi(\tau_1) r^2 d\tau,$$

$$l = 0 \quad \int C_0(\tau_1, \tau_2) \psi(\tau_1) \psi(\tau_2) r_1^2 r_2^2 d\tau_1 d\tau_2 = 4\pi \int \delta_1^{(0)} \psi r^2 d\tau \cdot \int \delta_1^{(0)} \psi r^2 d\tau - \int \delta_1^{(0)} \psi(r) \psi(r) r^2 d\tau,$$

so gibt der in (D, IV, 3) ausgeschriebene Term von $\langle \bar{G} \rangle$

$$\text{für } \bar{L}_2 > 0 : \quad \sim N^2 \left(\frac{\bar{L}_1 \bar{L}_2 2}{0 \ 0 \ 0} \right)^2$$

$$\text{für } \bar{L}_2 < 0 \ (\Rightarrow \bar{L}_1 \bar{L}_2 2) : \sim \beta \cdot \bar{L}_1 \int \bar{G}_1^{(0)} \frac{\partial}{\partial x} (\bar{L}_2 \bar{G}_2^{(0)}) dx \int \bar{G}_1^{(0)} \bar{G}_2^{(0)} dx$$

und kompensiert damit gerade den in (D, IV, 3) ausgeschriebenen Term von $\langle \bar{G} \rangle$, welcher im Falle $\bar{L}_1 = \bar{L}_2 = 0$ die Größenordnung $N^2 \beta$ liefern würde. In ähnlicher Weise kompensieren sich bei den anderen $\bar{L}_1, \bar{L}_2$ -Werten die jeweiligen Terme, welche in (D, IV, 3) zu N^2 -Abhängigkeiten führen würden.

Wir erhalten somit:

$$\langle \bar{F} \cdot \bar{G} \rangle^{\text{def}} = \langle \bar{F} \rangle^{\text{def}} \cdot \langle \bar{G} \rangle^{\text{def}} \sim N^2 \left(\frac{\bar{L}_1 \bar{L}_2 2}{0 \ 0 \ 0} \right)^2 \sim O(N^2) .$$

Zusammen mit (D, IV, 2) ergibt sich die Tabelle zu D, V, 4.

Literaturverzeichnis

- 1 D.J. Thouless u. R.E. Peierls, *Nucl. Phys.* 28, 134 (1958)
- 2 H.D. Zeh, *Zs. Physik* 188, 361 (1965)
- 3 H. Bouchiat-Jean u. J. Yoccoz, *Nucl. Phys.* 78, 353 (1966)
- 4 P. Ben, H.J. Mang u. P. Ring, *Zs. Physik*, 22, 26 (1970)
- 5 B. Banerjee, H.J. Mang u. P. Ring, *Nucl. Phys.* A 225, 366 (1973)
- 6 B. Banerjee, P. Ring u. H.J. Mang, *Nucl. Phys.* A 221, 564 (1974)
- 7 P. Ring, H.J. Mang u. B. Banerjee, *Nucl. Phys.* A 225, 141 (1974)
- 8 A. Passler, P. Grümmer, L. He u. J. Grün, *Phys. Lett.* 48 B, 87 (1974)
- 9 J. Yoccoz, *Proc. Phys. Soc.* A 70, 388 (1957)
- 10 J.J. Griffin u. M. Rich, *Phys. Rev. Letters* 2, 342 (1959)
- 11 E.G. Nilsson u. G. Prior, *Nucl.-Phys. Nord.* 22, No. 16 (1961)
- 12 F. Villars u. N. Schwine-Rogerson, *Ann. of Phys.* 63, 443 (1971)

- 13 H. Ruder u. H. Volz, Z. Naturf. 23a, 1419 (1968)
- 14 H. Ruder u. H. Volz, Z. Naturf. 24a, 1171 (1969)
- 15 H. Ruder, Z. Naturf. 28a, 206 (1973)
- 16 H. Ruder, Z. Naturf. 28a, 1500 (1973)
- 17 H. Näpfel, H. Ruder u. H. Volz, Z. Naturf. 23a, 199 (1968)
- 18 H. Ruder, Z. Naturf. 23a, 579 (1968)
- 19 W. Büttner u. H. Ruder, Z. Naturf. 24a, 1163 (1968)
- 20 H. Letz, H. Ruder u. H. Volz, Z. Naturf. 25a, 317 (1970)
- 21 A.R. Edmonds, Drehimpulse in der Quantenmechanik, Bibliographisches Institut, Mannheim, 1964
- 22 A. Bohr, Rotational States of Atomic Nuclei, E. Munksgaard, Kopenhagen, 1954
- 23 A. Bohr u. B.R. Mottelson, Nuclear Structure, Vol. II: Nuclear Deformations, Reading, Mass., W.A. Benjamin, 1975
- 24 J. Bardeen, L.N. Cooper u. J.R. Schrieffer, Phys. Rev. 108, 1175 (1957)
- 25 B.R. Mottelson, Cours de L' Ecole d' Eté de Physique Théorique des Houches 1958, Dunod, Paris 1959
- 26 H.A. Bethe u. R.F. Bacher, Rev.Mod.Phys. 8 , 82 (1936)
- 27 A. Messiah, Quantum Mechanics, North-Holland Publish. Comp. Amsterdam 1961

Lebenslauf

Am 11.3.1949 wurde ich, Günter Wunner, als Sohn des Architekten Fritz Wunner und seiner Ehefrau Anneliese Wunner, geb. Adelman, in Darmstadt geboren.

In Nürnberg besuchte ich die Volksschule von 1955 bis 1959 und das Martin-Behaim-Gymnasium von 1959 bis 1968, 1966 unterbrochen durch einen vierteljährigen Gastschulaufenthalt in England.

Nach dem Abitur begann ich im November 1968 das Studium der Physik an der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg. Im Oktober 1970 legte ich die Vordiplom- und im Mai 1973 die Hauptdiplomprüfung ab. Während des Studiums erhielt ich ein Stipendium für besonders Begabte nach dem Bayerischen Begabtenförderungsgesetz.

Von November 1970 bis Mai 1973 war ich als studentische Hilfskraft am Mathematischen Institut und am Institut für Theoretische Physik beschäftigt. An diesem Institut arbeitete ich von Juni 1973 bis März 1974 als wissenschaftliche Hilfskraft und verwaltete dort seit April 1974 die Dienstgeschäfte eines wissenschaftlichen Assistenten.

Seit 1970 bin ich mit der Designerin (grad.) Anita Wunner-Held verheiratet und habe mit ihr drei Kinder.



Offsetdruck·Fotodruck

J. Hogl, 8520 Erlangen, Hauptstr. 109 (Nähe Martin-Luther-Platz) Tel. 22990